VOICU DOLOCAN

STRUCTURI CUANTICE CU SEMICONDUCTORI

EDITURA UNIVERSITĂȚII DIN BUCUREȘTI

BIBLIOTECA CENTRALĂ
UNIVERSITARĂ
București
Cota N 515644
Inventar C 199801651

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

VOICU DOLOCAN

STRUCTURI CUANTICE CU SEMICONDUCTORI

EDITURA UNIVERSITĂȚII DIN BUCUREȘTI
1997

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Referenţi ştiinţifici: Prof. dr. **Ion MUNTEANU**
Conf. dr. **Horia ALEXANDRESCU**

BIBLIOTECA CENTRALĂ UNIVERSITARĂ
BUCUREŞTI
COTA IV 515644
141/98

B.C.U. Bucureşti
C199801651

© EDITURA UNIVERSITĂŢII DIN BUCUREŞTI
Şos. Panduri, 90-92, Bucureşti; Telefon: 410.23.84

ISBN – 973–575–209–3

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Cuvânt înainte

Această carte reprezintă cursul predat studenţilor din anul al IV-lea secţia de Fizică tehnologică de la Facultatea de Fizică a Universităţii din Bucureşti.

Datorită tehnologiilor moderne, în permanentă perfecţionare, domeniul structurilor spectaculoase. Realizarea văilor cuantice de potenţial şi a superreţelelor, a firelor şi punctelor cuantice, a confirmat realitatea conceptelor noastre asupra structurii materiei şi aa proprietăţilor electronului. Nu este exclus ca cercetările viitoare să conducă la formarea unor concepte noi care să răspundă la unele întrebări fundamentale ale fizicii cum ar fi interacţia materiei, structura electronului etc. Dincolo de aspectul filosofic, structurile cuantice sunt importante şi prin aplicaţiile lor practice deosebite, prin obţinerea unor dispozitive cu performanţe superioare ca tranzitori, detectori de radiaţie, laseti etc.

Cartea cuprinde opt capitole şi o anexă. Primul capitol este dedicat heterojonc]iunilor, interfeţe din doi semiconductori diferiţi, cu ajutorul cărora se realizează structurile cuantice. În capitolele 2 şi 3 se prezintă caracteristicile structurilor cuantice şi proprietăţile optice. În capitolele 4 şi 5 se prezintă laserii, diodele luminiscente şi detectorii de radiaţie în infraroşu. Capitolul 6 este dedicat proprietăţilot electrice dintre care amintim efectul Hall cuantic şi cuantificarea conductanţei într-un fir cuantic. Metodele de preparare a structurilor cuantice, epitaxia cu fascicule moleculare şi depunerea din fază de vapori metal-organică, sunt prezentate în capitolele 7 şi 8.

Cartea swe adresează studenţilor de la facultăţile de fizică, chimie, facultăţile tehnice, cercetătorilor, inginerilor, profesorilor de fizică, tuturor celor pasionaţi de cunoaştere.

Sperăm, stimate cititor, că şi această carte să-ţi întărească convingerea că ştiinţa şi tehnologia, societatea omenească, merg într-un singur sens: înainte.

Prof. dr. Voicu Dolocan

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Capitolul I

Heterojoncțiuni

1.1. *Considerații generale.*

Structura obținută prin contactul a două materiale diferite ,in particular a doi semiconductori diferiți, se numește heterojoncțiune. Metodele moderne de creștere a cristalelor, cum ar fi epitaxia cu fascicule moleculare si epitaxia din fază de vapori organo-metalică, permit obținerea unor heterojoncțiuni cu interfețe perfect plane. Diagrama de benzi de energie a unei heterojoncțiuni $Al_xGa_{1-x}As$ este reprezentată in Fig.1.1. S-a presupus că semiconductorul cu bandă interzisă E_{g1} largă, AlGaAs, este de tip n si are loc un transfer de electroni de pe donorii din acest semiconductor în banda de conducție a semiconductorului cu banda interzisă E_{g2}, îngustă, GaAs de tip p. Electronii transferați se află într-o vale de potențial și se comportă ca electroni bidimensionali. Așa cum se observă pe figură apar doi parametri importanți:

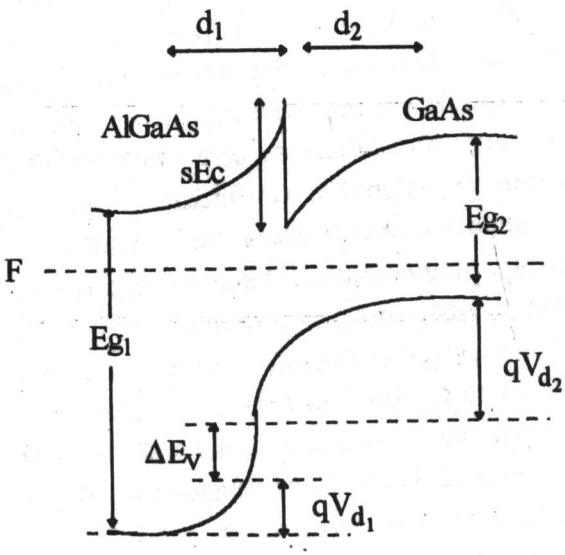


Fig. 1.1

Δe_c-discontinuitatea deplasarea) benzilor de conducție si ΔE_v-discontinuitatea benzilor de valență. Pentru a se obține o interfață de bună calitate trebuie ca cei doi semiconductori să aibă aceeași structură și aceeași constantă a rețelei. Heterojoncțiunea care satisface această condiție se numește heterojoncțiune cu rețeaua "acordată" (potrivită). In heterojoncțiunile cu rețeaua neacordată se formează dislocații la interfață. Aceste heterojoncțiuni se numesc heterojoncțiuni tensionate mecanic. Configurația discontinuităților benzilor prezentată in Fig.1.1, în care banda interzisă ingustă se află centrată in interiorul benzii interzise largi, se numește configurație de tip I. Forma simplificată a acestei configurații este reprezentată în Fig.1.2a. In Fig.1.2b se reprezintă o configurație de tip II în care are loc o deplasare în același sens a benzilor celor doi semiconductori. In Fig.1.2c se reprezintă configurația de tip III în care marginea inferioară a benzii de conducție a unui semiconductor se află situată sub marginea superioară a benzii de valență a celuilalt

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

semiconductor. In acest caz transferul de sarcină conduce la separarea spaţială a electronilor de goluri: electronii se acumulează in stratul semiconductor din stânga iar golurile se acumulează în stratul semiconductor din dreapta. Configuraţie de tip I prezintă structurile AlGaAs/GaAs, configuraţie de tip II prezintă structurile GaInAs/GaAsSb si CdS/InP iar configuraţie de tip III prezintă structurile InAs/GaSb (banda interzisă a InAs este aşezată mai jos decât banda interzisă a GaSb).

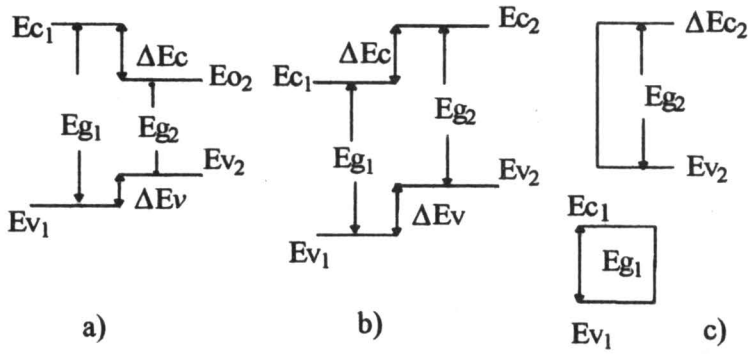


Fig. 1.2.

Heterojoncţiunile sunt structurile din doi semiconductori diferiţi care conţin o singură interfaţă. Strucuturile care conţin două interfeţe se numesc văi cuantice de potenţial (Fig.1.3) iar structurile care conţin mai multe interfeţe se numesc structuri multiple de văi cuantice sau superreţele (Fig.1.4). Aceste definiţii sunt corelate evident cu condiţia ca lărgimea unei văi cuantice să fie de ordinul lungimii de undă de Broglie asociată electronului. Banda interzisă a GaAs la temperaturi joase este 1,5 eV iar pentru x<0.45 banda interzisă a $Al_xGa_{1-x}As$ este cu 1,25x eV mai mare decât cea a GaAs. Datele experimentale arată că cea mai mare parte din diferenţa dintre benzile interzise este plasată intre marginile benzilor de conducţie producând o barieră de ~0.78xeV a electronilor în banda de conducţie. Diferenţa care rămâne dintre benzile interzise este situată între marginile benzilor de valenţă şi confinează golurile in stratul de GaAs cu înălţimea barierei de 0.22x eV unde x este fracţiunea de Al conţinut in $Al_{1x}Ga_xAs$. Aşa după cum am amintit mai sus, pentru a obţine heterojoncţiuni cu interfeţe de bună calitate trebuie ca cele două materiale utilizate să aibă aproximativ aceeaşi constantă a reţelei. In Fig.1.5 sunt prezentate benzile interzise si constantele de reţea ale unor materiale cu structura diamantului şi blendei de zinc. Se observă că se potrivesc bine cu reţeaua GaAs reţelele AlAs,Ge si ZnSe. In unele cazuri, pentru acordarea reţelei se utilizează compuşi ternari si cuaternari. De exemplu banda interzisă şi constanta de reţea a compusului $In_xGa_{1x}As$ variază între valorile GaAs (x=0) şi ale InAs(x=1), după curba reprezentată în figură.

Se observă că pentru x=0.53 constanta de reţea a acestui compus ternar coincide cu constanta de reţea a InP şi în acest caz între cele două materiale se obţine o heterojoncţiune perfectă. Există totuşi unele probleme în alegerea materialelor. Una dintre acestea este ca materialele utilizate trebuie sa aibă aproximativ acelaşi coeficient de dilatare.Se cunoaşte că straturile epitaxilae se cresc la temperaturi de câteva sute de ^{0}C. Dacă cele două materiale nu au a celaşi coeficient de dilatare, în timpul răcirii la temperatura mediului ambiant apar tensiuni în stratul de easupra. O altă problemă este legată de combinarea materialelor

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

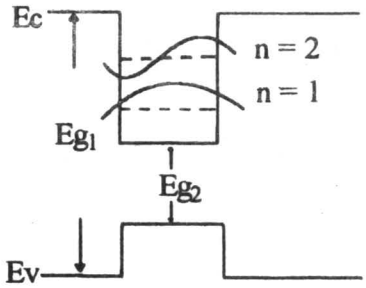


Fig. 1.3.

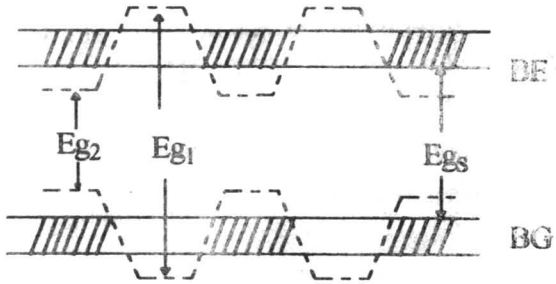


Fig. 1.4

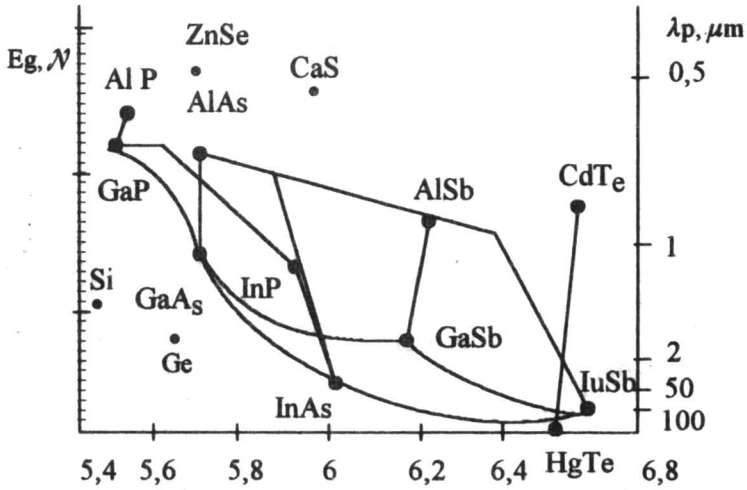


Fig. 1.5.

din grupe diferite ale tabelului periodic. De exemplu în cazul obţinerii heterojoncţiunii Ge/GaAs deoarece Ge poate fi utilizat ca dopant în GaAs are loc o interdifuzie a acestuia in GaAs în timpul procesului de creştere ceea ce modifică proprietăţile interfeţei faţă de cele dorite.In cazul realizării heterojoncţiunii InSb/CdTe se produce o reacţie chimică puternică la interfaţă şi apare o nouă fază, In_2Te_3,ceea ce face ca interfaţa să nu mai fie abruptă şi să devină complexă. Această reacţie poate fi diminuată prin creşterea presiunii parţiale a Cd atunci când se creşte CdTe peste InSb.

1.2. *Alinierea benzilor. Discontinuităţile dintre benzi.*

La realizarea unei heterojoncţiuni din doi semiconductori cu benzi interzise diferite apar discontinuităţi între benzile de conducţie ΔE_c, şi de valenţă ΔE_v, la interfaţă. In volum, structura electronică si potenţialul cristalin din semiconductor rămân nemodificate. Discontinuităţile benzilor determină unele proprietăţi optice ale structurii şi joacă rol de bariere pentru transportul purtătorilor de sarcină. Pentru determinarea valorilor acestor

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

discontinuităţi s-au propus mai multe modele. Aceste modele pot fi clasificate în două categorii:1) modele macroscopice şi (1) modele microscopice. De asemenea s-au efectuat şi calcule de selfconsistenţă la interfaţă.Cele mai multe heterojoncţiuni satisfac proprietatea de liniaritate,adică benzile semiconductorilor constituenţi se aliniază faţă de un nivel de referinţă. Din această proprietate rezultă că discontinuităţile trebuie să fie comutative şi tranzitive. Dacă notăm cu $\Delta E_v(A,B)$ discontinuitatea dintre benzile de valenţă a doi semiconductori A si B avem

$$\Delta E_v(A,B)-\Delta E_v(B,A)=0 \qquad (2.1)$$

şi

$$\Delta E_v(A,B)+\Delta E_v(B,C)=\Delta E_v(A,C) \qquad (2.2)$$

Dacă folosim ca nivel de referinţă un nivel din volumul semiconductorului atunci apare că alinierea benzilor nu depinde de orientarea interfeţei. Aşa după cum vom vedea mai departe orientarea interfeţei are un oarecare efect asupra alinierii benzilor. De asemenea, proprietatea de tranzitivitate (2.2) nu este satisfacută în toate heterojoncţiunile.

Există următoartele trei modele macroscopice de determinare a discontinuităţilor benzilor: (a) regula afinităţii electronice [1], (b) modelul; empiric al nivelului adânc [2] si (c) regula anionului comun. Prezentăm în continuare în ce constă aceste modele. Afinitatea pentru electroni χ reprezintă energia necesară pentru a extrage un electron de la marginea inferioară a benzii de conducţie din semiconductor la nivelul vidului. Nivelul vidului este acelaşi pentru toate materialele. Discontinuitatea dintre benzile de conducţie este egală cu diferenţa dintre afinităţile electronice

$$\Delta E_c=E_{c1}-E_{c2}=\chi_1-\chi_2 \qquad (2.3)$$

Discontinuitatea benzilor de valenţă se determină dacă se cunosc benzile interzise ale celor doi semiconductori. Astfel, (Fig.1.2)

$$\Delta E_v+\Delta E_c=E_{g1}-E_{g2} \qquad (2.4)$$

in cazul configuraţiei de tip I şi

$$\Delta E_c+\Delta E_v=E_{g2}-E_{g1} \qquad (2.5)$$

în cazul configuratiei de tip II. Acest model este incorect în multe cazuri deoarece afinitatea electronică este o mărime determinată experimental care cuprinde şi alte contribuţii decât cele de interfaţă şi anume contribuţiile de suprafaţă (dipoli, relaxare, etc). O formă modificată a acestei reguli a fost propusă în [3] în care se scade din afinitate energia câmpului electrostatic de la suprafaţă (aceasta din urmă se calculează). Un alt model empiric este modelul nivelului adânc. Acest model se bazează pe presupunerea că nivelele adânci formate în banda interzisă de către metalele de tranziţie (dopante) au aceeaşi energie faţă de nivelul vidului pentru semiconductorii din aceeaşi clasă. Aceste nivele pot fi considerate ca nivele de referinţă pentru alinierea (poziţionarea) benzilor de valeţă ale acestor semiconductori. De exemplu, pe

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

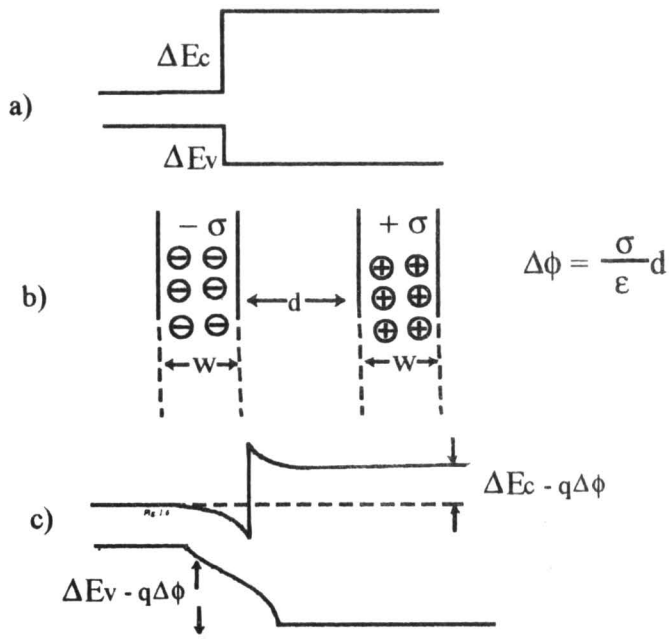
baza acestui model se obţine ΔE_v=0,45 ±0,1 eV la interfaţa AlAs/GaAs ceea ce concordă foarte bine cu rezultatele experimentale [4]. Regula anionului se bazează pe faptul că maximul benzii de valenţă provine în principal de la stările p anionice, energia acestora fiind relativ independentă de cation. Astfel in heterojoncţiunile în care cei doi semiconductori au anionul comun este de aşteptat ca discontinuitatea benzilor de valenţă să fie mică in comparaţie cu discontinuitatea benzilor de conducţie şi astfel $\Delta E_c \approx \Delta E_g$. Această regulă este utilizată atunci când nu dispunem de date experimentale exacte.In Tabela 1.1 se prezintă valorile discontinuităţii benzilor de valenta ΔE_v pentru unele heterojoncţiuni determinate prin modelul macroscopic [1] coloana (1), prin modele microscopice [5] coloana (2), prin calcul de selfconsistenţă la interfaţă [6], coloana (3), şi rezultatele experimentale [7], coloana (4). Se observă că pentru cele mai multe heterojonctiuni II-V si IV-VI regula anionului nu este valabilă deoarece ΔE_v are valori destul de mari. Modelele microscopice iau in considerare detaliile microscopice ale heterojoncţiunii. Există trei asemenea modele: (1) modelul lui Frensley si Kroemer [8], (2) modelul lui Harrison [9] si (3) modelul nivelului de energie corespunzător neutralităţii sarcinii [10]. Dintre acestea, primul model dă o concordanţă mai bună cu rezultatele experimentale.

Tabelul 1.1

Hiperojoncţiunea	1	2	3	4
AlP-Si	-	0,91	1,03	-
AlP-GaP	-	0,46		0,3
AlAs-Ge	0,62	0,87	1,05	0,95
AlAs-	0,1	0,55	0,37	0,40
AlSb-GaSb	0,44	0,38	0,38	0,40
GaP-Si	0,19	0,45	0,61	0,80
GaAs-Ge	0,19	0.32	0,63	-
InAs-GaSb	0,54	0,43	0,38	0,59
ZnSe-Ge	1,09	1,52	2,17	1,52
ZnSe-GaAs	1.26	1,20	1,59	1,10
CdTe-HgTe	-	0,51	0,27	0,13
CdTe-InSb	0,95	0,84	1,19	0,87
HgTe-InSb	-	-	0,91	-
ZnTe-GaSb	-	-	0,83	-
InGaAs-InP	-	0,26	0,41	0,38

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Valoarea discontinuității benzilor depinde de următorii factori: tensiunea mecanică, orientarea suprafeţelor la interfață, tranzitivitate, legăturile chimice,iar în cazul compușilor ternari și cuaternari, și de compoziţie. Dependenţa de tensiunea mecanică o vom discuta într-un paragraf separat. Ea este caracteristică heterojoncțiunilor tensionate adică heterojoncțiunilor în care constantele de rețea nu sunt acordate.In acest paragraf ne-am referit și ne referim în continuare la heterojoncțiuni cu constante acordate (aproape identice). S-a observat experimental că în unele cazuri discontinuitățile benzilor depind de orientarea interfeţei [11]. Insă în cele mai multe cazuri diferenţa între discontinuităţi pentru diverse orientări ale interfeţei este neglijabilă (în limita erorilor experimentale) [12]. Legăturile chimice pot afecta discontinuitatea benzilor în două moduri.In cazul heterojoncțiunii GaSb/InAs la interfață apar legături fie Ga-As,fie In-Sb , care sunt diferite ca intensitate de legăturile Ga-Sb si In-As.Aceste legături determină o relaxare considerabilă la interfață, care afectează dipolii de la interfață si alinierea benzilor.In cazul heterojoncțiunii InSb/CdTe apar interacţii chimice care coduc la formarea unui strat In_2Te_3 și deci determinarea discontinuității este mai complicată [13]. Dependenţa de compoziţie a fost cel mai mult studiată in sistemul $Al_xGa_{1-x}As$/GaAs,atât teoretic cât și experimental ,pentru toate valorile lui x, ΔE_g=1,255x eV. Pentru x<0,37 s-a găsit experimental [14] că ΔE_v=0,22x eV și ΔE_c=0,78x eV. De asemenea, proprietățile de comutativitate (2.1) si transitivitate (2.2) nu sunt în toate cazurile satisfăcute. De exemplu, ΔE_c pentru ZnTe/CdS (ZnTe depus peste CdS) este diferit cu 0,1 eV de ΔE_c pentru CdS/ZnTe (CdS depus peste ZnTe) iar ΔE_v(CuBr/GaAs)-ΔE_v(CuBr/Ge)ΔE_v(Ge/GaAs)=0.04eV și nu zero cum rezultă din proprietatea de tranzitivitate. Nesatisfacerea acestor condiţii se datorează influenţei dipolilor de interfață asupra alinierii benzilor. Dipolul de interfață este mare acolo unde transferul de sarcină la interfață este mare.In incheierea acestui paragraf prezentăm câteva metode de modificare a discontinuităţilor interbenzilor la interfață. Modificarea discontinuităţilor benzilor la interfață se poate face prin mai multe metode: (a) realizarea unei compoziţii gradate la interfață, (b) realizarea unui dipol la interfață prin doparea cu donori și, respectiv acceptori într-o parte și în cealaltă a interfeţei [14], (c) doparea unui singur strat, abrupt, numit strat d, la interfață în apropierea zonei cu bandă



https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

interzisă ingustă [15]. In cazul realizării compoziţiei gradate se modifică compoziţia x în mod gradat la interfaţă ,de exemplu în cazul heterojonctiunii $Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs$,dela x=0 la GaAs la x=0,3 la $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$.Această metodă se utilizează la fabricarea heterojoncţiunii emitor-bază a tranzistorului bipolar cu heterojoncţiuni. Cea de a doua metodă constă în realizarea unui dipol la interfaţă. In Fig.1.6a este reprezentată diagrama de benzi de energie a unei heterojoncţiuni abrupte în condiţii de bandă plată (când energiile de extracţie a electronilor din cei doi semiconductori sunt egale între ele și când nu există sarcină spaţială la interfaţă). In timpul preparării se cresc două straturi, unul donor în regiunea cu bandă interzisă largă și unul acceptor în zona cu bandă interzisă ingustă ,fiecare de grosime w și situat la distanţa d/2 de interfaţă (Fig.1.6b), unde d≤10nm. Concentraţia impurităţilor de dopare este suficient de mică (de la 10^{17} la $10^{19}cm^{-3}$) astfel că este posibilă deflexia purtătorilor din cele două straturi.Notând cu σ densitatea de sarcină dintr-un strat, diferenţa de potenţial dintre cele două straturi este $\Delta\phi=(\sigma/\varepsilon)d$. Așa cum se observă pe Fig.1.6c, discontinuitatea dintre benzile de conducţie scade cu $q\Delta\phi$, pe când discontinuitatea dintre benzile de valenţă creşte cu $q\Delta\phi$. Dacă grosimea stratului de dipol este subţire,bariera de potenţial triunghiulară din banda de conducţie este transparentă pentru electroni. Prin doparea heterojoncţiunii AlGaAs/GaAs cu Si și Be la o temperatură a substratului de 600^0C timp de ½ ore,s-a obţinut d mai mic decât 1 nm.Intr-o asemenea heterojoncţiune s-a obţinut o creştere a fotocurentului cu un ordin de mărime faţă de heterojoncţiunea în care nu s-a realizat un asemenea strat de dipol. Notăm că dacă se inversează ordinea dopanţilor,adică se dopează regiunea cu banda interzisă ingustă cu donori iar zona cu banda interzisă largă cu acceptori, creşte discontinuitatea între benzile de conducţie și scade discontinuitatea dintre benzile de valenţă.

1.3. *Regiunea de sarcină spatială*

In Fig.1.2 am reprezentat diagrama de benzi de energie a celor trei tipuri de heterojoncţiuni în condiţii de bandă plată, adică atunci când nu există sarcină spaţială la interfaţă. In realitate cei doi semiconductori sunt dopaţi și la interfaţă apare o regiune de sarcină spatială.In acest caz diagrama de benzi de energie a structurii reprezentată in Fig.1.2a arată ca in Fig.1.1 iar diagramele de benzi de energie ale structurilor reprezentate in Fig.1.2 b si c arată ca in Fig.1.7a și, respectiv, b. Ne vom referi în cele ce urmează la structura din Fig.1.1. Semiconductorul 1 are constanta dielectrică ε_1 și este dopat cu donori de concentraţie N_D, fiind prin urmare de tip n. Semiconductorul 2 are constanta dielectrică ε_2 și este dopat de tip p,având concentraţia acceptorilor N_A. Regiunile de sarcină spatială din cei doi semiconductori au grosimile d_1 și respectiv,d_2. Potenţialele de difuzie asociate cu regiunile da sarcină spatială le notam cu V_{d1} și,respectiv,V_{d2}.O asemenea heterojoncţiune care constă dintr-un semiconductor de tip p cu banda interzisă îngustă și un semiconductor de tip n cu banda interzisă largă se numeşte heterojonctiune p-N. Calculul parametrilor regiunii de sarcină spaţială se face ca și în cazul joncţiunii p-n cu excepţia faptului că în acest caz cele două regiuni au constante dielectrice diferite. Densitatea de sarcină spaţială în regiunea stratului de barieră are valorile

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$\rho(x) = \begin{cases} 0, & x<d_1 \\ qN_d, & -d_1<x<0 \\ -qN_A, & 0<x<d_2 \\ 0, & x>d_2 \end{cases}$$

Pentru a găsi grosimea stratului de sarcină spaţială trebuie să integrăm ecuaţia Poisson

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon\varepsilon_o}$$

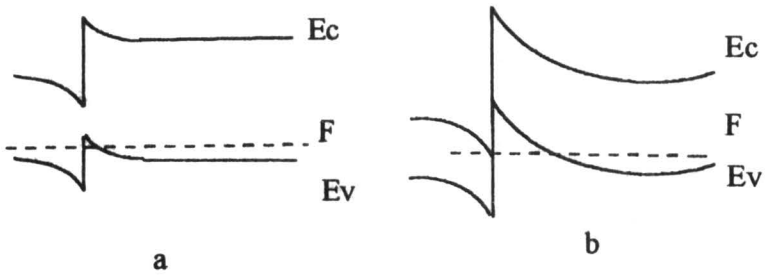


Fig. 1.7

în cele două regiuni 1 si 2. Potenţialul de difuzie V_d este divizat pe cei doi semiconductori,astfel că $V_d=V_{d1}+V_{d2}$. De asemenea,tensiunea externă aplicată V se divide pe cei doi semicondutori astfel că $V=V_1+V_2$. Pentru a acorda cele două soluţii ale ecuaţiei Poisson la interfaţă scriem continuitatea deplasării dielectrice

$$\varepsilon_o\varepsilon_1 F_1(x=0)=\varepsilon_0\varepsilon_2 F_2(x=0)$$

Pentru grosimile regiunilor de sarcină spaţială in semiconductorii 1 si 2 se obţin expresiile

$$d_1 = \left[\frac{2N_A\varepsilon_o\varepsilon_1\varepsilon_2(V_d - V)}{\varepsilon_0 N_D(\varepsilon_1 N_D + \varepsilon_2 N_A)}\right]^{1/2}$$

$$d_2 = \left[\frac{2N_D\varepsilon_o\varepsilon_1\varepsilon_2(V_d - V)}{\varepsilon_o N_A(\varepsilon_1 N_D + \varepsilon_2 N_A)}\right]^{1/2}$$

Grosimea totală a regiunii de sarcină spaţială este $d=d_1+d_2$. Raportul dintre căderile de tensiune din cei doi semiconductori se obţine din legea conservării sarcinii

$$\frac{V_{d1} - V_1}{V_{d2} - V_2} = \frac{N_A\varepsilon_2}{N_D\varepsilon_1} \qquad (3.1)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Capacitatea regiunii de sarcină spaţială pe unitatea de arie a heterojoncţiunii este dată de expresia

$$C = \left[\frac{qN_D N_A \varepsilon_o \varepsilon_1 \varepsilon_2}{2(\varepsilon_1 N_D + \varepsilon_2 N_A)} \frac{1}{V_d - V} \right]^{1/2}$$

Să considerăm acum o heterojoncţiune în care cei doi semiconductori au acelaşi tip de conducţie, aşanumita heterojoncţiune izotopică, de exemplu n-N (Fig.1.8). In acest caz,datorită continuităţii nivelului Fermi, apare o acumulare de sarcină spaţială de electroni în semiconductorul cu banda interzisă ingustă. Acest fenomen apare chiar când acest semiconductor este slab dopat, aproape intrinsec. Această sarcină spaţială acumulată în semiconductorul 2 din Fig. 1.8 este compensată de o sarcină spaţială de deflexie, pozitivă,dată de donorii ionizaţi din semiconductorul 1. Electronii din stratul de sarcină spaţială din semiconductorul 2 sunt proveniţi de pe donorii care alcătuiesc sarcina spaţială pozitivă din semiconductorul 1. Ei au trecut în semiconductorul 2 deoarece aici au energie potenţială mai mică. In acest fel electronii sunt separaţi spaţial de donorii ionizaţi şi fenomenele de împrăştiere pe aceştia fiind eliminate, creşte mobilitatea electronilor (la temperaturi joase, unde joacă rol important împrăştierea pe impurităţi ionizate). Heterojoncţiunile n-N stau la baza superreţelelor cu dopare modulată.

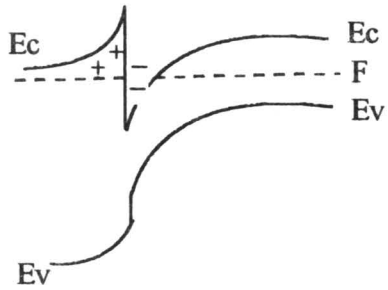


Fig. 1.8

1.4. *Curentul electric*

Curentul electric printr-o heterojoncţiune este suma a mai multor componente [16,17]: o componentă de injecţie numită curentul de emisie termoelectronică (în literatura străină, termoionică), o componentă de tunelare şi o componentă de recombinare pe stările de interfaţă. Ne vom ocupa în cele ce urmează de curentul de emisie termoelectronică şi curentul tunel. Pentru a studia curentul de emisie termoelectronică considerăm o heterojoncţiune n-N (Fig.1.8). Notăm cu ε_1 si N_{D1} constanta dielectrică şi concentraţia donorlior în semiconductorul 1 (în cazul nostru, semiconductorul cu banda interzisă largă) şi cu ε_2 si N_{D2}, în semiconductorul 2 (cu banda interzisă ingustă). La echilibru, bariera pentru electronii care trec de la stânga la dreapta este qV_{d1} iar bariera pentru electronii care trec de la dreapta la stânga este ΔE_c-qV_{d2} (Fig.1.1). Aplicând din exterior tensiunea V barierele energetice se modifică şi devin $q(V_{d1}-V_1)$ si ΔE_c-$q(V_{d2}-V_2)$. Curentul de emisie termoelectronică ce circulă de la stânga la dreapta este dat de expresia

$$J_{12} = qN_{c1}T_{12}\sqrt{\frac{kT}{2\pi m_1}}\exp(-qV_d / kT)\exp(qV_1 / kT) \qquad (4.1)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde N_{c1} este densitatea efectivă de stări de energie din banda de conducţie din semiconductorul 1, m_1 este masa efectivă a electronilor în acest semiconductor, T_{12} este probabilitatea de transmisie prin emisie termoelectronică. Curentul de la dreapta la stânga este dat de expresia

$$J_{21} = qN_{c2}T_{21}\sqrt{\frac{kT}{2\pi m_2}}\exp[-(\Delta E_c - qV_{d2})/kT]\exp(-qV_2/kT) \qquad (4.2)$$

La echilibru termic (fără tensiune aplicată) nu circulă curent prin structură şi se obţine

$$\frac{N_{c1}T_{12}}{\sqrt{m_1}}\exp(-qV_{d1}/kT) = \frac{N_{c2}T_{21}}{\sqrt{m_2}}\exp[-(\Delta E_c - qV_{d2})/kT] \qquad (4.3)$$

La tensiunea aplicată curentul net este egal cu diferenţa dintre cele două componente

$$J = qN_{c1}T_{12}\sqrt{\frac{kT}{2\pi m_1}}\exp(-qV_{d1}/kT)\exp(RV/kT) \qquad (4.4)$$

unde, având în vedere (3.1)

$$R=1/(1+N_{D1}\varepsilon_1/N_{D2}\varepsilon_2)$$

In scrierea expresiei (4.4) s-a neglijat curentul invers J_{21}, ceea ce este just la tensiuni mari. Prezentăm în continuare expresia curentului tunel. Cunoscând probabilitatea T_t de transmisie prin tunelare, densitatea de curent tunel într-un interval mic de energie dE din jurul energiei E este dată de expresia

$$J = q\int_0^{\infty}\frac{\hbar k_x}{m}T_t(E)I(E_x)dE_x \qquad (4.5)$$

I(x) se numeşte funcţia sursei şi depinde de probabilitatea f(E) de ocupare cu electroni a stărilor de pe care tunelează electronii,

$$I(E_x) = \frac{q}{(2\pi)^3\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dk_y\int_{-\infty}^{\infty}dk_z f(E) = \frac{4\pi mkT}{h^3}\ln[1+\exp(\frac{E_F - E_x}{kT})] \qquad (4.6)$$

Desigur,că s-a presupus că stările pe care tunelează electronii sunt libere. E_F este energia Fermi. Un studiu detaliat asupra acestor probleme cititorul găseşte în [18]. Pentru a găsi probabilitatea de transmisie T_t considerăm o barieră triunghiulară (Fig.1.9). Ecuaţia Schrodinger pentru un electron se scrie

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + (U-E)\Psi = 0$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde Ψ este funcţia proprie iar E este valoarea proprie a energiei electronului. Pentru $x<0$, $U=0$ iar pentru $x>0, U=E_F+q\Phi_b-qFx$ unde F este cămpul electric si $q\Phi_b$ este înălţimea barierei. Există o continuitate a probabilităţii de a găsi electronul în orice punct în funcţie de poziţie şi de asemenea o continuitate a impulsului în funcţie de poziţie. Matematic, aceste condiţii de continuitate se scriu

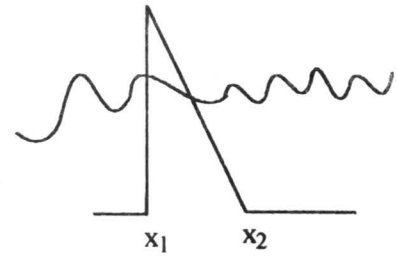


Fig. 1.9

$$\Psi_1(x_1) = \Psi_2(x_1);$$

$$\frac{\partial\Psi_1}{\partial x}\Big]_{x1} = \frac{\partial\Psi_2}{\partial x}\Big]_{x1};$$

$$\Psi_1(x_2) = \Psi_2(x_2);$$

$$\frac{\partial\Psi_1}{\partial x}\Big]_{x2} = \frac{\partial\Psi_2}{\partial x}\Big]_{x2}$$

unde x_1 si x_2 sunt punctele de întoarcere clasice. Functiile proprii sunt date de expresiile:

$$\Psi_1(x)=C_1\exp(ik_yy+ik_zz)[\exp(ik_xx)+C_2\exp(-ik_xx)]$$

pentru $x<x_1$ şi

$$\Psi_2(x)=C_3[B_i(\eta)+iA_i(\eta)]$$

pentru $x>x_2$, unde

$$\eta = -\left(\frac{2mqF}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(x - \frac{q\Phi_b + E_F - E_x}{qF}\right)$$

iar $A_i(\eta)$ si $B_i(\eta)$ sunt funcţiile Airy şi s-a considerat $x_1=0$. Pentru x la distanţă suficient de mare de primul punct de întoarcere clasică, funcţia Airy are forma asimptotică

$$\Psi_2(x) = \left(\frac{\pi^2}{|\eta|}\right)^{-1/4} C_3 \exp(i\pi/4)\exp\left(i\frac{2}{3}|\eta|^{3/2}\right)$$

Curentul de probabilitate asociat cu această funcţie de undă este

$$J = i\frac{\hbar}{2m}\left(\Psi\frac{d\Psi^*}{dx} - \Psi^*\frac{d\Psi}{dx}\right) = \frac{\hbar}{\pi m}(2mqF/\hbar^2)^{1/2}|C_3|^2$$

Curentul de probabilitate al funcţiei incidente, care este o undă plană, este $\hbar k/m$. Probabilitatea de transmisie prin efect tunel prin bariera triunghiulară considerată este dată de expresia

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$T_t = \frac{4}{\pi}\frac{1}{k}\left(\frac{2mqF}{\hbar^2}\right)^{1/3}\{[B_i(\eta_o) - \frac{1}{k}\left(\frac{2mqF}{\hbar^2}\right)^{1/3} A_i(\eta_o)]^2 +$$

$$[A_i(\eta_o) + \frac{1}{k}\left(\frac{2mqF}{\hbar^2}\right)^{1/3} B_i(\eta_o)]^2\}; \qquad (4.7)$$

$$\eta_o = \frac{1}{qF}\left(\frac{2mqF}{\hbar^2}\right)^{1/3}(q\Phi_b + E_F - E_x)$$

Dezvoltând in serie funcţiile Airy se obţine următoarea formă simptotică a probabilităţii de transmisie

$$T_t = 4\frac{(E_F + q\Phi_b - E_x)^{1/2} - E_x^{1/2}}{E_F + q\Phi_b}\exp[-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2mqF}{\hbar^2}\left(\frac{|q\Phi_b + E_F - E_x|}{qF}\right)^3}] \qquad (4.8)$$

Substituind această expresie in (4.5) se obţine

$$J = \frac{q^2 m_o F^2}{16\pi^2 m\Phi_b}\exp[-\frac{4\sqrt{2m}(q\Phi_b)^{3/2}}{3q\hbar F}] = \alpha F^2 \exp(-F_o / F) \qquad (4.9)$$

unde am notat

$$F_o = \frac{4\sqrt{2m}(q\Phi_b)^{3/2}}{3q\hbar}$$

Această ecuaţie numită ecuaţia Fowler-Nordheim, mai poate fi scrisă

$$\ln\frac{J}{F_o^2} = \ln\alpha - \frac{F_o}{F} \qquad (4.10)$$

S-a presupus că tunelarea electronilor este elastică. Electronii cu energie mai mare au bariera mai mică şi deci probabilitatea lor de tunelare este mai mare.

1.5. *Heterojoncţiuni tensionate mecanic.*

Atunci când se realizează o heterojoncţiune cu constante de reţea diferite între ele,diferenţa dintre constantele de reţea induce o tensiune elastică uniformă în stratul subţire ce creşte epitaxial pe substratul ce constituie celălat semiconductor ce compune heterojoncţiunea. Acest fenomen are loc atunci când diferenţa relativă dintre constantele de reţea este mai mică decât 7% şi grosimea stratului subşire este mai mică decât o anumită valoare critică [18]. In acest caz atomii din stratul subţire relaxează în direcţie perpendiculară pe interfaţă (constanţa de reţea se modifică în această direcţie) astfel ca să se reducă energia de deformare elastică la interfaţă, iar in direcţii paralele cu interfaţa constanta de reţea se

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

modifică astfel încât să fie egală cu constanta de rețea a substratului (modificările au loc astfel încât se menține același volum al celulei elementare ca și în stratul netensionat). Acest tip de creștere se numește creștere pseudomorfă. Peste o anumită valoare a grosimii stratului subțire energia de deformare în stratul pseudomorf devine așa de mare,astfel că pentru micșorarea ei apar dislocații la interfață. Dislocațiile au efecte nedorite asupra proprietăților optice și electrice și de aceea apariția lor trebuie evitată. Grosimea minimă a stratului epitaxial de la care apar dislocațiile se poate evalua prin mai multe metode. O metodă constă în egalarea energiei stratului tensionat cu energia de formare a dislocațiilor, prin care acesta se detensionează (relaxează). O altă metodă ia in considerare condițiile în care dislocațiile elicoidale existente în strat pot migra sub acțiunea tensiunii mecanice și forma o dislocație de nepotrivire de constantă de rețea [20]. In ambele modele densitatea de energie pe unitatea de arie pentru un strat tensionat de grosime h este dată de expresia

$$E_v = 2G(\frac{1+\nu}{1-\nu})hf$$

unde G este modulul de forfecare ,n este raportul Poisson și f este diferența de constantă de rețea între stratul subțire și substrat. Densitatea de energie a stratului subțire în care au apărut dislocații (prin detensionare) în presupunerea că este o rețea de dislocații este dată de expresia

$$E_r=Gb/4$$

unde b este vectorul Burger al unei dislocații de margine la planul interfeței. La o valoare critică a lui h, E_r devine mai mică decât E_n și stratul se detensionează pe baza apariției dislocațiilor nepotrivirii de rețea.Valoarea critică $h=h_c$ se obține pentru $E_n=E_r$. Într-o altă metodă, metoda dinamică [21], se obține h_c din egalarea forței exercitată de către tensiunea de discordanță a rețelei asupra unei linii de dislocație

$$F_s = G(\frac{1+\nu}{1-\nu})bh\varepsilon$$

cu tensiunea din linia de dislocație

$$F_D = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}[\ln(h/b)+1]$$

ε este mărimea deformării interfaciale. Rezultate mai realiste se obțin prin simularea pe calculator a interfețelor tensionate [21]. Prezentăm în continuare efectele tensiunii asupra structurii de benzi și discontinuităților benzilor la interfață. Componenta hidrostatică a tensiunii, care corespunde variației de volum, produce o modificare a benzilor față de energia potențială medie a electronului din solid. Această modificare se ia în considerare utilizând noțiunea de potențial de deformare. Notând cu $\Delta\Omega/\Omega$ variația relativă ce revine volumului ocupat de un atom în cristal, se scrie

$$\Delta E_c=D_c(\Delta\Omega/\Omega)$$

$$\Delta E_v=D_v(\Delta\Omega/\Omega)$$

unde ΔE_c reprezintă deplasarea energiei benzii de conducție, ΔE_v reprezint deplasarea energiei benzii de valență, D_c si D_v sunt potențialele de deformare hidrostatice ale benzii de

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

conducţie şi, respectiv, de valenţă. Valorile acestora, exprimate in eV, pentru o serie de semiconductori sunt prezentate in Tabela 1.2. In aceeaşi tabelă mai sunt prezentate lăgimea benzii interzise E_g, despicarea spin-orbită Δ_o, potenţialul de deformaţie de forfecare b şi potenţialul de deformare d. Toate mărimile sunt exprimate in eV.D_v este în general pozitiv iar D_c este în general negativ, astfel că în prezenţa unei tensiuni de comprimare, banda interzisă se micşorează astfel că

$$\Delta E_g=(D_c-D_v)(\Delta\,\Omega/\Omega) \qquad (5.2)$$

Aceasta relaţie nu ia în considerare despicarea spin-orbită a benzii de valenţă.

Tabelul 1.2

Semiconductorul	E_g	Δ_0	D_v	D_c	b	d
Si	1,17	0,04	2,46	4,18	-2,1	-4,8
Ge	0,74	0,30	1,24	-1,54	-2,9	-5,3
GaAs	1,52	0,34	1,16	-7,17	-1,7	-4,5
AlAs	2,23	0,28	2,49	4,09	-	-
InAs	0,41	0.38	1,00	- 5,08	-1,8	-3,6
GaP	2,35	0,08	1,70	3,26	-1,5	-4,6
AlP	2,51		3,15	5,12	-	-
InP	1,42	0,11	1,27	-5,04	-1,6	-4,2
GaSb	0,75	0.82	0,79	-6,85	-2,0	-4,8
AlSb	1,70	0.65	1,38	3,05	-1,4	-4,3
InSb	0,14	0,81	0,36	-6,17	-2,1	-5,0
ZnSe	2,83	0,43	1,65	-4,19	-1,2	
ZnS	3,84	0,07	2,31	-4,09	-0,8	
ZnTe	2,39	0,91	0,79	-5,83		
CdTe	1,59	0,93	0,55	-3,96	-1,2	-2,8

În absenţa unei tensiuni mecanice şi a despicării spin-orbită banda de valenţă a cristalelor de tipul diamantului şi a blendei de zinc este triplu degenerată în punctul Γ. Datorită interacţiei spin-orbită cele trei subbenzi se despică într-o bandă dublu degenerată,care conţine subbanda golurilor uşoare E_{v1} si subbanda golurilor grele E_{v2} şi o subbandă E_{v3} situată mai jos cu Δ_0, despicarea spin-orbită. Poziţia maximului benzii de valenţă in raport cu valoarea sa medie E_{vm} se scrie

$$E_v=E_{vm}+(\Delta_0/3)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

La o deformare de forfecare simetria este intreruptă și apare o despicare a benzilor degenerate. La o deformare uniaxială, de exemplu pe direcția [001], apare o despicare adițională dată de relațiile

$$\Delta E_{v1} = -\frac{1}{6}\Delta_o + \frac{1}{4}\delta E_{oo1} + \frac{1}{2}[\Delta_o^2 + \Delta_o \delta E_{oo1} + \frac{9}{4}(\delta E_{oo1})^2]^{1/2}$$

$$\Delta E_{v2} = \frac{1}{3}\Delta_o - \frac{1}{2}\delta E_{oo1}$$

$$\Delta E_{v3} = -\frac{1}{6}\Delta_o + \frac{1}{4}\delta E_{oo1} - \frac{1}{2}[\Delta_o^2 + \Delta_o \delta E_{oo1} + \frac{9}{4}(\delta E_{oo1})^2]^{1/2}$$

Deplasarea în energie δE_{oo1} poate fi scrisă în funcție de potențialul de deformație la forfecare, b, și componentele tensorului de deformatie ε_{ij}

$$\delta E_{oo1}=2\sqrt{3}\ d\varepsilon_{xy}$$

Pentru o nepotrivire relativă a constantelor de rețea mai mică decât 4% se poate aplica pentru calculul deplasarii benzilor teoria potențialului de deformație, liniară. Dacă această nepotrivire depășește 4% trebuie luați în considerare termeni cuadratici în expresiile de mai sus. In semiconductorii cu benzi directe, banda de conducție în Γ este nedegenerată și este afectată numai de tensiunea hidrostatică. In semiconductorii cu benzi indirecte despicarea datorită deformării a minimelor benzii de conducție are loc în același mod ca despicarea benzii de valență. Cu creșterea deformării este posibilă intersecția benzilor și semiconductorul cu benzi indirecte să devină semiconductor cu benzi directe. Prin urmare, deformarea datorată nepotrivirii constantelor de rețea la interfață modifică discontinuitățile benzilor deoarece modifică benzile interzise ale celor doi semiconductori și pozițiile extremurilor benzilor de conducție și de valență. O heterojoncțiune în care nepotrivirea constantelor de rețea alterează discontinuitățile benzilor este hetero-joncțiunea $Si_{1-x}Ge_x/Si$. Această heterojoncțiune prezintă importanță deoarece dă posibilitatea construirii unor dispozitive noi pe baza tehnologiei siliciului. O superrețea Si_4/Ge_4 (001) a fost propusă ca material cu banda interzisa directă.Dacă se crește o heterojoncțiune Si/Ge pe un substrat $Si_{1-xs}Ge_{xs}$, s-a găsit că discontinuitatea benzilor acestei interfețe (Si/Ge) depinde liniar de compoziția xs a substratului pe care este crescută ΔE_v(Ge/Si)=0,76-0,57xs Această variație se datorează variației cu xs a despicării subbenzilor de valență: cu creșterea lui xs despicarea benzilor de valență în Si crește iar în Ge scade. Ambele variații pot fi descrise prin teoria liniară a potențialului de deformație, astfel că ΔE_v depinde liniar de xs. In cazul heterojoncțiunii $Si_{1-x}Ge_x/Si$ crescută pe un substrat $Si_{1-xs}Ge_{xs}$ discontinuitatea benzilor de valență se modifică dupa relația [22] ΔE_v=0,75x-0,57xs. Altă posibilitate prin care nepotrivirea constantelor de rețea la interfață afectează discontinuitățile benzilor constă în deplasarea atomilor în zona de la interfață si deci modificarea dipolului de la interfață. Aceasta nu are efect în heterojonctiunea Si/Ge însă are efect important în heterojoncțiunea $In_xGa_{1-x}As/GaAs$. Calculele au arătat că în această ultimă heterojoncțiune poziția atomilor de la interfață influențează puternic discontinuitatea benzilor de valență ceea ce conduce la concluzia că dipolul de interfață are efect important asupra discontinuității benzilor. S-a găsit că Δ pentru o heterojoncțiune InAs/GaAs crescută pe un substrat $In_{xs}Ga_{1-xs}As$ variază după legea

$$\Delta E_v=0,05-0,75xs,eV$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

poziţia atomilor de la interfaţă influenţează puternic discontinuitatea benzilor de valenţă ceea ce conduce la concluzia că dipolul de interfaţă are efect important asupra discontinuităţii benzilor. S-a găsit că ΔE_v pentru o heterojoncţiune InAs/GaAs crescută pe un substrat $In_{xs}Ga_{1-xs}As$ variază după legea

$$\Delta E_v=0,05-0,75xs,eV$$

Cu creşterea lui xs această heterojoncţiune trece dintr-o heterojoncţiune de tip II într-o heterojoncţiune de tip III [23]. La un rezultat similar se ajunge atunci când se creşte heterojonctiunea $In_xGa_{1-x}As$/GaAs pe un substrat din $In_{xs}Ga_{1-xs}As$. In schimb creşterea heterojoncţiunii $In_xGa_{1-x}As$/GaAs pe un substrat de GaAs nu prezintă o modificare cu x a discontinuităţii benzilor.

1.6. *Determinarea experimentală a discontinuităţii benzilor la interfaţă*

Discontinuităţile benzilor la interfaţă se pot determina din masurători de fotoemisie, fotoluminescenţă şi din măsuratori electrice. Măsurătorile electrice utilizate în acest scop se bazează pe măsurarea caracteristicii capacitate-tensiune şi a caracteristicii curent-tensiune. Prezentăm în continuare aceste metode.

1.6.1. *Măsurarea caracteristicii capacitate-tensiune.*

Din măsurarea caracteristicii capacitate-tensiune se poate determina concentraţia netă de impurităţi într-o joncţiune p-n asimetrică sau intr-o barieră Schottky. Profilul concentraţiei impurităţilor se poate determina din măsurarea capacităţii regiunii de deflexie în funcţie de tensiunea aplicată la polarizare inversă. Capacitatea diferenţială este dată de expresia

$$C=\Delta Q/\Delta V$$

unde ΔV este o creştere mică între două valori ale tensiunii continue şi ΔQ este variaţia sarcinii nete totale pe întregul dispozitiv datorită variaţiei tensiunii. Pentru o heterojoncţiune N-AlGaAs/n-GaAs purtătorii majoritari sunt electronii şi

$$\Delta Q = q[\int_0^L \{n(x,V+\Delta V\} - N_D^+(x,V+\Delta V)\}dx - \int_0^L \{n(x,V) - N_D^+(x,V)\}dx]$$

N^+_D este concentraţia impurităţilor donoare ionizate şi n este concentraţia electronilor. Se măsoară capacitatea C pentru diverse valori ale tensiunii V şi se determină profilul C-V.Din măsurarea profilului C-V se poate determina atât înălţimea barierei V_b cât şi densitatea de sarcină de interfaţă

$$\sigma = \int_0^L \{n(x) - N_D^+(x)\}dx$$

Din măsurarea acestor două mărimi se poate determina discontinuitatea benzilor de conducţie [25,26]

$$\Delta E_c = V_b - \frac{kT}{q}\ln\frac{n(x_2)/N_c(x_2)}{n(x_1)/N_c(x_1)}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde A este aria diodei. Determinarea lui ΔE_c se face in următoarele condiţii simplificatoare: (a) se cunoaste profilul impurităţilor de dopare, (b) impurităţile de dopare sunt complet ionizate şi capcanele adânci nu sunt luate in considerare, (c)sarcina de la interfaţă este independentă de polarizare, (d) constanta dielectrică relativă este uniformă spaţial. Notăm că asemenea măsurători se efectuează pe o heterojoncţiune N-n AlGaAs/GaAs căreia i se adaugă o barieră Schottky la suprafaţa AlGaAs, deoarece heterojoncţiunea N-n are bariera mică şi la polarizare inversă ar trece prin structură curenţi excesiv de mari. Adăugarea barierei Schottky dă posibilitatea să se mărească tensiunea inversă de polarizare. Din măsurătorile efectuate pe structuri $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ s-a obţinut

$$\Delta E_c=(0,79\pm0,2)x,eV$$

Rezultatele obţinute din măsurători C-V coincid cu cele obţinute din măsurători I-V şi de fotoconducţie.

1.6.2. *Măsurarea caracteristicii I-V.*

Pentru determinarea discontinuităţilor benzilor prin această metodă se utilizează o heterojoncţiune dublă GaAs/AlGaAs/GaAs în care stratul AlGaAs este nedopat iar straturile de GaAs sunt dopate n^+ şi respectiv n^- sau n şi, respectiv, p sau ambele slab dopate de tip p. Curentul de emisie termoelectronică este dat de expresia

$$J=J_o\{\exp(qV/kT)-1]$$

$$J_o=A^*T^2\exp(-q\Phi/kT)$$

unde $\Phi+\Phi_b+\eta$,A^* este constanta lui Richardson, T este temperatura, Φ_b este bariera de potenţial în raport cu marginea benzii GaAs iar η este diferenţa de potenţial dintre nivelul Fermi şi marginea benzii GaAs.Variaţia lui η cu temperatura se determină din măsurarea concentraţiei purtătorilor de sarcină astfel că din măsurarea mărimii

$$|\ln(J/T^2)+\eta/kT| =\ln A^*-\Phi_b/kT$$

şi reprezentarea membrului din stânga in funcţie de 1/T se determină înălţimea barierei Φ_b. Dacă straturile din GaAs sunt de tip n atunci $q\Phi_b=\Delta E_c$, discontinuitatea dintre benzile de conducţie ale GaAs si AlGaAs.Dacă straturile din GaAs sunt de tip p, atunci $q\Phi_b=\Delta E_v$[27]. Studii detaliate asupra heterojoncţiunilor cititorul găseşte în [28,29]. Menţionăm de asemenea contribuţiile cercetătorilor români în domeniul heterojoncţiunilor[30-33]

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Bibliografie

1. R.L.Anderson, Solid-State Electron.5, 341 (1962).
2. J.M.Langer, H.Heinrich, Phys.Rev. Lett. 55, 1414 (1985).
3. J.A.van Vechten, J.Vac. Sci. Technol. B3, 1240 (1985).
4. G.Magaritondo, Surf. Sci. 168, 439 (1986)
5. J.Tersoff, Phys. Rev. B30, 4874 (1984)
6. C.van de Walle,R.Martin, Phys .Rev. B35, 8154, 10625 (1987)
7. Heterojuntion and discontiuities physics and device application, d. F. Capasso, G. Magaritondo, Elsevier, 1987 .
8. W. Frensley, H.Kroemer, Phys. Rev. B16, 2642 (1977).
9. W.A.Harrison, J.Vac. Sci. Technol. 14, 1016 (1977).
10. C.Tejedor, F.Flores, J.Phys. C11 ,L19 (1978).
11. J.Waldrop et al. J.Vac. Sci. Technol. B3, 1295 (1985).
12. D.Nolte, Appl.Phys. Lett.54, 759 (1989).
13. K.Mackey et al. Appl.Phys.Lett.49,354 (1986).
14. F.Capasso et al. Appl.Phys.Lett.46,664 (1985)
15. G.Muller et al. Appl.Phys.Lett.55,1564 (19879)
16. A.C.Milnes, D.L.Feucht, Heterojunctions and netal-semicopnductor junctions, Academic Press, 1972.
17. V.Dolocan, Fizica dispozitivelor cu corp solid,Edit.Academiei,1978.
18. V.Dolocan, Fenomene de tunelare si aplicatii, Edit.Stiintifica si Enciclopedica, 1989.
19. J.van der Menoe, J. Appl.Phys. 34, 123 (1962).
20. J.W.Matthews, F.E.Blakeslee, J, Cryst .Growth, 2 7, 118 (1974).
21. J.C.Matthews, J.Vac. Sci. Technol.12, 126 (1975).
22. C.C.Matthai, P.Ashu, J.Physique Coll.S1, C1-873 (1990)
23. J.M.Bass, C.Matthai, Semicond.Sci. and Technol. 6, 1091 (1990).
24. M.Olouni, C.Matthai, J.Phys.Condens.Matter, 2, 5253 (1990).
25. H.Kroemer et al, Appl.Phys. Lett.312,2951(1980); Solid State Electron.24, 655 (1981).
26. J.Langer et al, Phys. Rev. B38, 7723 (1988).
27. J.Batey, S. Wright, D. Dimaria, J.Appl. Phys. 57, 484 (1985), 59, 200 (1986).
28. Physics and Technology of heterojunction devices, ed.R.Morgan, R.Williams, Peter Peregrinus, Ltd, 1991.
29. S.Tiwari, Compound semiconductor device physics, Academic Press, 1992.
30. A.Goldenblum, in Probleme actuale ale fizicii semiconductorilor, Edit.Academiei, 1970.
31. I.B.Petrescu-Prahova, Teza de doctorat, Bucuresti 1975.
32. P.Mihailovici, Teza de doctorat, Bucuresti,1979
33. A.Hartman, L.Vescan, C.Dieker, T.Stoica, Phys.Rev. B48, 18276 (1993)

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Capitolul II

Văi cuantice și superrețele

2.1. *Nivelurile de energie ale electronilor*

Confinarea electronilor în valea cuantică de potenţial, modifică atât structura benzii de energie a acestora cât și densitatea de stări. Spectrul de energie a purtatorilor de sarcină în banda de conducţie și, respectiv de valenţă se obţine rezolvând ecuaţia lui Schrodinger

$$[-\frac{\hbar^2}{2m_o}\nabla^2 + V(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \qquad (1.1)$$

unde m_o este masa electronului liber, $\mathbf{r}$ este vectorul de poziţie, Ψ este funcţia de undă a electronului și $V(\mathbf{r})$ este energia potenţială a electronului în reţeaua cristalină. Datorită periodicităţii lui $V(\mathbf{r})$ soluţiile acestei ecuaţii sunt funcţii de undă Bloch de forma

$$\Psi = u(\mathbf{k},\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}$$

unde $\mathbf{k}$ este vectorul de undă al electronului si $u(\mathbf{k},\mathbf{r})$ este funcţia Bloch periodică cu perioada reţelei cristaline. Pentru a defini soluţiile localizate ale ec. (1.1), de exemplu într-o vale cuantică de potenţial, funcţia de undă Ψ se ia ca o combinaţie liniară de funcţii Bloch (1.2). Utilizând un set arbitrar de coeficienţi de dezvoltare, $C(\mathbf{k})$, funcţia de undă localizată spaţial se poate scrie sub forma

$$\Psi = \int C(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}u(\mathbf{k},\mathbf{r})d^3\mathbf{k} \approx u(0,\mathbf{r})\int C(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}d^3\mathbf{k} = F(\mathbf{r})u(\mathbf{r}) \qquad (1.3)$$

Aceasta descriere a stărilor localizate este cunoscută sub numele de aproximaţia funcţiei anvelopă.In această aproximaţie se presupune că în interiorul unei benzi de energie funcţia Bloch depinde slab de $\mathbf{k}$, cel puţin în vecinătatea marginii benzii și astfel ea poate fi reprezentată prin valoarea ei la marginea benzii $u(0,\mathbf{r})\equiv u(\mathbf{r})$. Aceasta ne permite ca să scoatem funcţia Bloch în afara integralei și să considerăm funcţia anvelopă $F(\mathbf{r})$ ca fiind o integrală Fourier de unde plane (ec.1.3). Prin urmare soluţia ec.(1.1) conţine două componente: funcţia Bloch de la marginea benzii multiplicată cu o funcţie anvelopă ușor variabilă. Condiţiile de normare pentru cele două funcţii se scriu

$$\int_V F^*Fd^3\mathbf{r} = 1; \frac{1}{\Omega_o}\int_{\Omega_0} u^*ud^3\mathbf{r}' = 1$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde V este volumul cristalului şi Ω_o este volumul celulei unitate. Cu această alegere funcţia anvelopă are dimensiunile $1/\sqrt{V}$ pe când funcţia Bloch este adimensională. Funcţiile Bloch din benzile de conducţie şi, respectiv, de valenţă sunt ortogonale între ele

$$\int u_c^* u_v d^3\mathbf{r}'=0$$

Intr-un material masiv funcţia anvelopă este dată de formula simplă

$$F = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{kr}} \tag{1.3a}$$

Vom discuta în cele ce urmează forma funcţiei anvelopă şi spectrul de energie a electronilor în următoarele cazuri:gazul de electroni bidimensional (2D), din valea cuantică de potenţial, gazul de electroni unidimensional (1D), din firul cuantic şi gazul de electroni zero-dimensional, din punctul cuantic. Se arată că funcţia de undă anvelopă satisface ecuaţia [1,2]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]F(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}) \tag{1.4}$$

unde m este masa efectivă a electronului în cristal. Prin urmare, se observă că funcţia anvelopă satisface aceeaşi ecuaţie Schrodinger (1.1) cu deosebirea că masa electronului liber este înlocuită cu masa sa efectivă din cristal.

2.1.a. *Gazul de electroni bidimensional(2D)*

Considerăm un electron situat într-o vale cuantică de potenţial (Fig.1.3),cu dimensiunea L_x după direcţia x. In acest caz ecuaţia (1.4) devine

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x)]F(x,y,z) = EF(x,y,z) \tag{1.5}$$

Deoarece potenţialul U(x) nu depinde de y şi z funcţiile de undă în aceste direcţii sunt funcţii de undă plane, astfel că

$$F(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{L_y L_z}} \chi_n(x) e^{ik_y y} e^{ik_z z} \tag{1.6}$$

unde $\chi_n(x)$ satisface ecuaţia Schrodinger unidimensională

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right]\chi_n(x) = E_{nx}\chi_n(x) \tag{1.7}$$

unde L_y si L_z sunt dimensiunile cristalului pe direcţiile y si, respectiv, z. Este satisfacută condiţia $L_x \ll L_y, L_z$. Energia electronului este dată de expresia

$$E = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + E_{nx} \tag{1.8}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Soluţia ecuaţiei (1.7) este de forma

$$\chi_n(x)=A\sin k_x x+B\cos k_x x$$

Pentru valea rectangulară de lărgime L_x funcţia de undă trebuie să aibă o anumită paritate în raport cu reflexia într-un plan care trece prin centrul văii cuantice (x=0) in regiunea $|x|<L_x/2$

$$\chi_n(x)=B\cos k_x x, \qquad \text{pentru stările pare}$$

$$\chi_n(x)=A\sin k_x x, \qquad \text{pentru stările impare} \qquad (1.9)$$

Pentru o vale de potenţial de lărgime L_x şi cu înălţime infinită a barierelor,

$$U(x)=0, \qquad \text{pentru } |x|<L_x/2$$

$$U(x)=\infty, \qquad \text{pentru } |x|>L_x/2$$

se obţine,din condiţia ca χ să se anuleze la frontierele văii cuantice,

$$k_x=\frac{\pi}{L_x}(2n_x+1), \qquad (1.10)$$

pentru stările pare şi

$$k_x=\frac{\pi}{L_x}.2n_x \qquad (1.11)$$

pentru stările impare.Impunem condiţia de normare

$$\int\Psi^*\Psi d^3\mathbf{r}=1$$

Considerăm normarea pentru fiecare factor al lui F(1.6),astfel că

$$1=\int_{-L_x/2}^{L_x/2}\chi_n^*(x)\chi_n(x)dx \qquad (1.12)$$

Substituind în această egalitate valorile funcţiei $\chi_n(x)$ (1.9) se obţine $A=B=(2/L_x)^{1/2}$. Scriem în general $k_x=n_1\pi/L_x$ unde numărul cuantic n_1 ia valorile $n_1=1,2,3,4$ "Numărul cuantic n_1 nu poate lua valoare zero deoarece particula trebuie să se gasescă undeva în valea de potenţial aşa cum am presupus prin condiţia de normare. Presupunând că energia potenţială este zero în interiorul văii de potenţial, aşa cum am scris mai sus, subştituind (1.9) in (1.7) se obţine

$$E_{nx}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L_x}\right)^2 \qquad (1.13)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

2.1.b. *Gazul de electroni unidimensional (1D)*

In cazul văii cuantice de potenţial studiată mai sus, lărgimea L_x a acesteia, care coincide cu grosimea stratului subţire,este atât de mică încât este de ordinul lungimii de undă de Broglie a electronului. Astfel, este posibilă cuantificarea energiei electronului în direcţia x. Dacă se realizează un fir cuantic, adică un paralelipiped cu $L_x, L_y << L_z$, astfel încât L_x, L_y sunt de ordinul de mărime al lungimii de undă de Broglie, atunci este posibilă cuantificarea energiei electronului pe direcţiile L_x şi L_y, astfel încât electronul are o mişcare liberă numai în direcţia L_z. In acest caz gazul de electroni se numeşte unidimensional şi ecuaţia (1.4) se scrie

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x,y)\right]F(x,y,z) = EF(x,y,z)$$

Deoarece potenţialul nu depinde de z, funcţia de undă în direcţia z este o undă plană astfel că

$$F(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{L_z}}\chi(x,y)e^{ik_z z}$$

unde $\chi(x,y)$ satisface ecuaţia Schrodinger bidimensională

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,y)\right]\chi(x,y) = E_i\chi(x,y) \qquad (1.14)$$

In general această ecuaţie descrie subbenzile 1D cu starea $\chi(x,y)$ legată în două dimensiuni şi cu mişcarea liberă în direcţia z. Pentru o subbandă dată, energia stării (i,k_z) este dată de

$$E = E_i + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

In cazul unui fir rectangular infinit de adânc soluţia ec.(1.14) este de forma $\chi(x,y)=\chi(x)\chi(y)$ unde $\chi(x)$ este dat de ecuaţiile (1.9) cu k_x dat de relaţiile (1.10) si (1.11) iar

$\chi(y)=C\cos k_y y$ pentru stările pare

$\chi(y)=C\sin k_y y$ pentru stările impare. (1.15)

în intervalul $|y|<L_y/2$,unde $U(x,y)=0$ pentru $|y|<L_y/2$ şi $U(x,y)=\infty$ pentru $|y|>L_y/2$. Din condiţia ca funcţia de undă să se anuleze la capetele frontierei se obţine $k_y=(\pi/L_y)(2n_y+1)$ pentru stările pare si $k_y=(\pi/L_x).2n_y$ pentru stările impare. Din condiţia de normare a funcţiei de undă scrisă pe direcţia y se obţine $C=(2/L_y)^{1/2}$. Scriind sub forma generală $k_y=n_2\pi/L_y$, unde $n_2=1,2,3,$"se obţine, prin introducerea funcţiei de undă în ecuaţia (1.14), energia subbenzii unidimensionale

$$E_i = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{L_x^2} + \frac{n_2^2}{L_y^2}\right) \qquad (1.16)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

2.1.c. *Gazul de electroni zero dimensional*

Dacă realizăm un potenţial care confinează particulele în toate cele trei dimensiuni este posibil ca sistemul să aibă stări legate complet discrete. Acesta este un superatom sau un punct cuantic. Considerăm un electron confinat intr-o cutie rectangulară cu laturile L_x, L_y, L_z. Mişcarea electronului este descrisă de ec.(1.4) unde

$$F(x,y,z)=\chi(x)\chi(y)\chi(z) \qquad (1.17)$$

Presupunem că energia potenţială este zero în interiorul cutiei şi infinită în afara ei,adică la condiţiile scrise mai sus adăugăm şi condiţia $U(\mathbf{r})=0$, pentru $|z|<L_z/2$ si $U(\mathbf{r})=\infty$, pentru $|z|>L_z/2$,şi prin urmare la frontierele de confinare $F=0.\chi(x)$ este dat de ec.(1.9) iar $\chi(y)$ este dat de ec.(1.15). Introducând (1.17) în (1.4), proiecţia mişcării electronului în direcţia z este dată de funcţia

$$\chi(z) = D\cos k_z z, \quad \text{pentru stările pare}$$

$$\chi(z)=D\sin k_z z, \quad \text{pentru stările impare} \qquad (1.18)$$

unde $k_z=(\pi/L_z)(2n_z+1)$ pentru stările pare şi $k_z=(p/L_z).\ 2n_z$ pentru stările impare. Din condiţia de normare a funcţiei de undă scrisă pe direcţia z se obţine $D=(2/L_z)^{1/2}$. Scriind sub forma generală $k_z=n_3\pi/L_z$. unde $n_3=1,2,3$, "şi substituind (1.18) in (1.4) se obţine energia particulei în cutie sub forma

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{L_x^2}+\frac{n_2^2}{L_y^2}+\frac{n_3^2}{L_z^2}\right) \qquad (1.19)$$

2.2. *Densitatea de stări de energie*

Considerăm un cristal de dimensiuni L_x, L_y, L_z . Funcţia de undă care descrie mişcarea electronului trebuie să se anuleze la frontierele cristalului, deoarece acesta este forţat de către barierele de la suprafată să rămână în cristal. Soluţia sub formă de undă plană (1.3a) nu se anulează la frontiere. Pentru a fi satisfacută această condiţie trebuie să găsim o soluţie sub forma de undă staţionară ce se obţine prin suprapunerea a două unde plane care se propagă în sens invers. Această soluţie are forma sinusoidală. Din condiţia ca această funcţie să se anuleze la frontiere se găsesc valorile vectorului de unde. Astfel, pe direcţia x avem $\sin(k_x(-L_x/2))=\sin(k_xL_x/2)=0$ pentru stările impare şi $\cos(k_x(-L_x/2)=\cos(k_xL_x/2)=0$ pentru stările pare,şi la fel pe celelalte două direcţii. Găsim astfel valorile discrete ale vectorului de unda **k** al electronului

$$\mathbf{k}=n_1\mathbf{k}_x' + n_2\mathbf{k}_y' + n_3\mathbf{k}_z'$$

unde $k_x'=\pi/L_x, k_y'=\pi/L_y, k_z'=\pi/L_z$. Menţionăm că atunci când nu ne referim la stări localizate, într-un cristal funcţia de undă a electronului este funcţia de undă Bloch şi expresia de mai sus a vectorului de undă **k** sub forma de valori discrete se găseşte din condiţiile de ciclicitate Born-Karman. Numerele cuantice n_i au valori întregi pozitive şi negative; valoarea zero este exclusă de condiţia de normare. O variaţie de $2k_i'$ (i=x,y,z) de-a lungul fiecărei direcţii

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

definește o stare. Factorul 2 apare deoarece aceeași stare este definită atât pentru valorile pozitive cât și pentru cele negative ale lui n_i.I n materialul masiv o stare ocupă un cub de volum $(2\pi/L)^3$, unde am considerat $L_x=L_y=L_z$. Intr-o vale cuantică de potențial o stare ocupă o suprafață de arie $(2\pi/L)^2$ iar într-un fir cuantic o stare ocupă o lungime $(2\pi/L)$ în spatiul **k**. Numărul de stări ale vectorului de undă **k** ce au mărimea mai mică decât o anumită valoare k se găsește împărțind volumul V_k descris de acest vector în spațiul k la volumul unei stări. In cazul gazului de electroni tridimensional ,în aproximația benzilor de energie sferice, acest volum este o sferă și deci $V_k=4\pi k^3/3$; în cazul gazului de electroni bidimensional suprafața este un cerc de arie $V_k=\pi k^2$, iar în cazul gazului de electroni unidimensional lungimea descrisă de vectorul k este $V_k=2k$. Numărul total de stări din volumul V_k se scrie

$$N_s = \frac{V_k}{(2\pi / L)^s} \tag{2.1}$$

unde s are valoarea 1 pentru cazul 1D, valoarea 2 pentru cazul 2D și valoarea 3 pentru cazul 3D iar V_k are valorile corespunzatoare prezentate mai sus. Densitatea de stări g(k) se găsește din relația

$$\int g(k)dk = \frac{N_s}{V}$$

unde V este volumul cristalului, adică

$$g(k) = \frac{1}{V}\frac{dN_s}{dk} \tag{2.2}$$

Pentru a defini densitatea de stări în spațiul energiei se utilizează relația g(E)dE=g(k)dk, de unde

$$g(E) = \frac{g(k)}{dE / dk} \tag{2.3}$$

Pentru 3D,$E=\hbar^2k^2/2m$, se obține

$$N_s = \frac{4\pi k^3}{3}\frac{L^3}{(2\pi)^3} = \frac{k^3}{3}\frac{L^3}{2\pi^2}; g(k) = \frac{1}{L^3}k\frac{L^3}{2\pi^2}$$

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar k}{m}; g(E) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}k$$

Având în vedere expresia energiei și înmulțind cu factorul 2 pentru a lua în considerare degenerarea de spin, se obține

$$g_{3D}(E) = \frac{1}{2\pi^2}(\frac{2m}{\hbar^2})^{3/2}E^{1/2} \tag{2.4}$$

Pentru 2D se obține

$$N_s = \pi k^2\frac{L_yL_z}{2\pi^2} = k^2\frac{L_yL_z}{4\pi^2}$$

$$g(k) = \frac{1}{L_xL_yL_z}\frac{L_yL_z}{2\pi}k = \frac{k}{2\pi L_x};$$

$$g_{2D}(E) = \frac{k}{2\pi}\frac{m}{\rangle\hbar^2k} = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{1}{L_x}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Această expresie se referă la un singur nivel de energie. Pentru toate nivelele de energie din valea cuantică de potențial se găsește

$$g_{2D}(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2 L_x}\sum_{nx}\theta(E - E_{nx}) \tag{2.5}$$

unde E_{nx} este dată de ec.(1.13) și s-a ținut cont de degenerarea de spin; $\theta(x)$ este funcția treaptă, $\theta(x)=0$ pentru $x<0$ si $\theta(x)=1$ pentru $x>0$. Pentru 1D se obține

$$N_s = 2k_z\frac{L_z}{2\pi} = \frac{L_z}{\pi}k_z$$

$$g(k) = \frac{1}{L_x L_y L_z}\frac{L_z}{\pi} = \frac{1}{\pi L_x L_y};\ g(E) = \frac{1}{\pi L_x L_y}\frac{m}{\hbar^2}\frac{1}{k_z}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + E_i;\ E_i = E_{n1,n2} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2\pi^2}{L_x^2} + \frac{n_2^2\pi^2}{L_y^2}\right)$$

$$k_z = \frac{(2m)^{1/2}}{\hbar}(E - E_{n1,n2})^{1/2}$$

$$g(E) = \frac{1}{\pi L_x L_y}\frac{m}{\hbar^2}\frac{\hbar}{(2m)^{1/2}}\frac{1}{(E - E_{n1,n2})^{1/2}}$$

Dacă înmulțim cu 2, luând în considerare degenerarea de spin, și sumăm după toate numerele cuantice n_1 si n_2 se scrie

$$g_{1D}(E) = \frac{(2m)^{1/2}}{\pi\hbar L_x L_y}\sum_{n1,n2}(E - E_{n1,n2})^{-1/2} \tag{2.6}$$

Densitatea de stări pe unitatea de volum ale unul ansamblu de puncte cuantice identice necuplate, constă din funcții δ la energiile discrete ale fiecărui punct cuantic

$$g_{0D} = \frac{2}{L_x L_y L_z}\sum_{n1,n2,n3}\delta(E - E_{n1,n2,n3}) \tag{2.7}$$

Factorul 2 s-a introdus pentru a se lua în considerare degenerarea de spin. Dacă există mai multe puncte cuantice pe unitatea de volum se multiplica g_{0D} cu acest număr. Densitatea de stări de energie pentru toate cele patru cazuri este reprezentată în Fig.2.1.

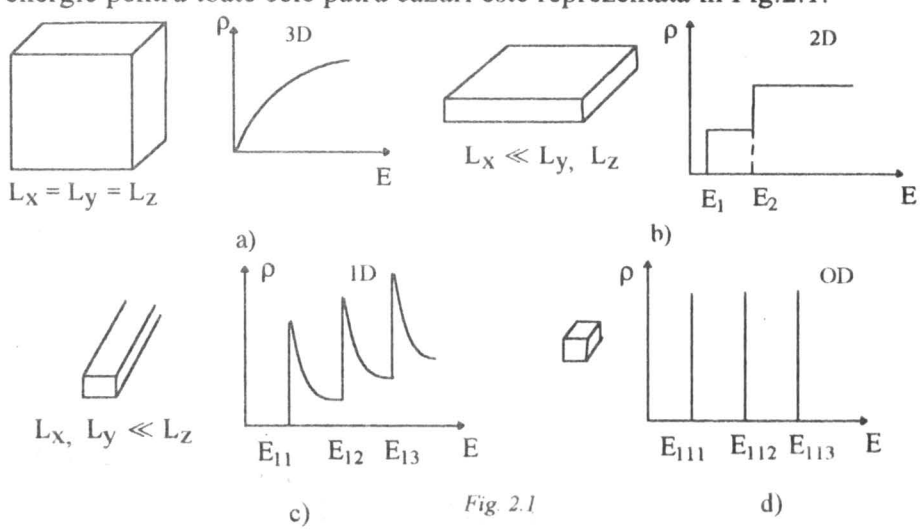


Fig. 2.1

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

2.3. *Valea cuantică de potențial cu pereți finiți*

In paragraful 2.2a s-au prezentat funcțiile de undă și nivelurile de energie ale electronilor pentru valea cuantică de potențial cu pereți infiniți. In acest paragraf vom studia aceste probleme pentru valea cuantică cu pereți finiți, reprezentată în Fig. 2.2. Presupunem că la $x=\pm L/2$ înălțimea barierei este egală cu U_o. Luăm mijlocul văii ca centru al sistemului de coordonate. In această situație soluția ec.(1.7) poate fi ori pară ori impară, deoarece problema prezintă un plan de simetrie care trece prin centrul sistemului de coordonate. Astfel se poate scrie fie

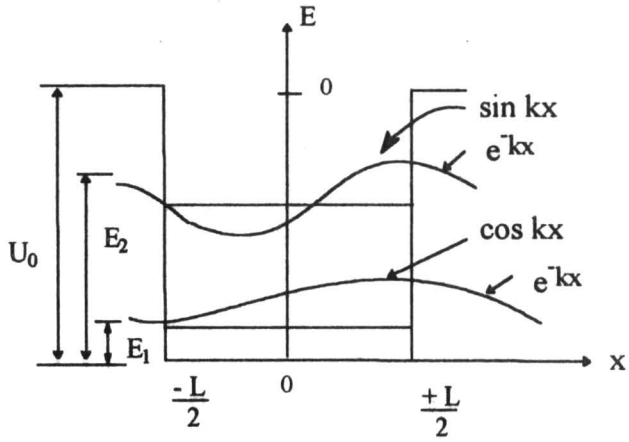


Fig. 2.2

$$\begin{aligned}
&\chi(x) = A\sin kx, |x| < L/2 \\
&\chi_1(x) = A_1 \exp[-k_1(x - L/2)], x > L/2 \\
&\chi_1(x) = A_1 \exp[k_1(x + L/2)], x < -L/2
\end{aligned} \tag{3.1}$$

sau

$$\begin{aligned}
&\chi(x) = B\cos kx, |x| < L/2 \\
&\chi_1(x) = B_1 \exp[-k_1(x - L/2)], x > L/2 \\
&\chi_1(x) = B_1 \exp[k_1(x + L/2), x < -L/2
\end{aligned} \tag{3.2}$$

unde

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - U_o; E = -\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1}; -U_o < E < 0 \tag{3.3}$$

m este masa efectivă a electronului în valea de potențial iar m_1 este masa acestuia în regiunea barierei. Utilizăm condițiile de continuitate la frontiera $x=\pm L/2$

$$\begin{aligned}
&\chi = \chi_1 \\
&\frac{1}{m}\frac{d\chi}{dx} = \frac{1}{m_1}\frac{d\chi_1}{dx}
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Apariția masei efective în continuitatea pantei (dertivatei) la interfață se obține prin integrarea ecuației masei efective (1.7) pe interfața vale-barieră. S-a arătat că aceasta nu se datorează conservarii curentului de particule la interfață deoarece densitatea de curent a funcțiilor de undă reale (așa cum este cazul în văile cuantice) este totdeauna zero de ambele

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

părţi ale interfeţei [3,4]. Conservarea curentului (1/m) $d\chi/dx$ conduce la continuitatea aceleiaşi mărimi şi de aceea se poate face confuzie. Pentru soluţia de forma (3.1) condiţiile de continuitate la frontieră conduc la relaţiile

$$A\sin\frac{kL}{2} = A_1$$

$$-\frac{k}{m}\cos(\frac{kL}{2}) = \frac{k_1 A_1}{m_1}$$

de unde se obţine

$$\frac{k}{m}\cot an(kL/2) = -\frac{k_1}{m_1} \tag{3.5}$$

Pentru soluţiile de forma (3.2) din condiţiile de continuitate se obţine

$$B\cos(kL/2) = B_1$$

$$\frac{k}{m}\sin(kL/2) = \frac{k_1 B_1}{m_1}$$

de unde rezultă

$$\frac{k}{m}\tan(kL/2) = \frac{k_1}{m_1} \tag{3.6}$$

Ecuaţiile (3.5) şi (3.6) pot fi rezolvate numeric sau grafic. O soluţie grafică simplă se obţine pentru $m=m_1$. Utilizând ec.(3.3) ecuaţiile (3.5) si (3.6) se pot scrie astfel încât să depindă numai de k

$$\sin(\frac{kl}{2}) = \frac{k}{k_o}, \text{pentru } \tan(kL/2)<0 \tag{3.7}$$

$$\cos(\frac{kL}{2}) = \frac{k}{k_o}, \text{pentru } \tan(kL/2)>0 \tag{3.8}$$

unde

$$k_o^2 = \frac{2mU_o}{\hbar^2}$$

Se observă că ecuaţiile (3.7) si (3.8) depind implicit numai de k. Aceste două ecuaţii sunt reprezentate în Fig. 2.3. Soluţiile sunt localizate la intersecţiile liniei drepte cu panta $1/k_o$ cu curbele f=cos(kL/2) cu

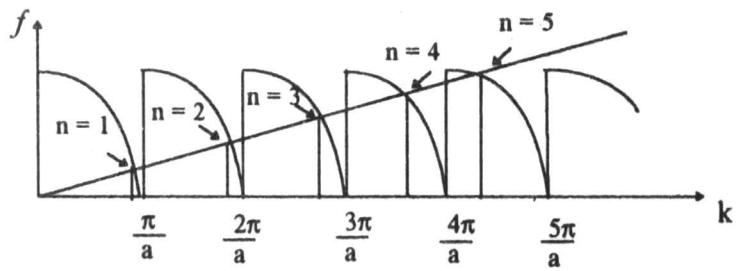


Fig. 2.3

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

tan(kL/2)>0 (funcţii de undă pare) sau cu curbele f=sin(kL/2), cu tan(kL/2)<0 (funcţii de undă impare). Numărul de stări legate este dat de expresia

$$1+\mathrm{Int}[(\frac{2mU_oL^2}{\pi^2\hbar^2})^{1/2}]$$

unde simbolul Int[x] însemnează partea întreagă din x.In relaţiile de mai sus am eliminat indicele x de la vecorul de undă k.In tratarea prezentată am considerat că mişcarea electronului în banda de conducţie este descrisă de ec.(1.60) unde s-a luat egală cu zero valoarea vectorului de undă k_{yz} al electronului din planul k_y-k_z. Dacă această valoare se consideră diferită de zero, atunci din ec.(1.5) în locul ec. (1.7) se obţine ecuaţia

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x)+U_k]\chi(x)=E(k_{yz})\chi(x) \qquad (3.9)$$

unde contribuţia energiei din planul k_y-k_z am notat-o cu U_k şi am considerat-o ca energie potenţială iar $E(k_{yz})$ reprezintă valoarea proprie a energiei electronului pentru k_{yz} diferit de zero. Considerăm ca U_k este o perturbaţie a stării electronului din cazul U_k=0. Prersupunem noile soluţii de forma $\chi(x)=\chi(0)+d\chi$ şi $E(k_{yz})=E(0)+dE$ unde $\chi(0)$ şi E(0) reprezintă soluţiile neperturbate determinate mai sus. Substituim aceste expresii în ec.(3.9). Apoi multiplicăm la stânga întreaga ecuaţie cu $\chi^*(0)$ şi integrăm de la x=-∞ la x=+∞. Procedând în continuare conform teoriei perturbaţiiilor obţinem soluţia pentru problema perturbată în funcţie de soluţia pentru problema neperturbată. Rezultatul final se poate scrie sub forma

$$E(k_{yz})=E(0)+\frac{\hbar^2k_{yz}^2}{2m^*} \qquad (3.10)$$

unde

$$\frac{1}{m^*}=\frac{\Gamma}{m}+\frac{1-\Gamma}{m_1}$$

m este masa electronului din valea de potenţial iar m_1 este masa sa din bariera de potenţial şi

$$\Gamma=\frac{\int_{-L_x/2}^{L_x/2}|\chi(0)|^2dx}{\int_{-\infty}^{\infty}|\chi(0)|^2dx} \qquad (2.11)$$

se numeşte factor de confinare. Din (3.10) se observă că energia în funcţie de vectorul de undă k_{yz} din planul k_y-k_z este de forma parabolică cu o masă efectivă din plan care reprezintă o medie a maselor efective din valea şi din bariera de potenţial. Rezultă că fiecare nivel de energie n_1 reprezintă o subbandă de energie în planul k_y-k_z.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

2.4. *Nivelurile de energie ale golurilor în valea cuantică de potențial*

Structura tipică de benzi de energie pentru un semiconductor III-V este reprezentată în Fig. 2.4. Cele trei subbenzi de valență sunt cunoscute sub denumirea de subbanda golurilor grele (GG), subbanda golurilor ușoare (GU) și subbanda, D, separată datorită despicării spin- orbită. Fiecare bandă de energie provine dintr-un nivel de energie discret al atomilor izolați din care este compus cristalul. Astfel, se poate considera că banda de conducție provine de la un orbital s al atomului iar banda de valență provine de la cele trei orbitale atomice p:p_x,p_y,p_z. Funcțiile de undă Bloch din cristal corespunzătoare acestor orbitale se notează u_s și u_x,u_y,u_z. Această corespondență se face deoarce funcțiile de undă Bloch păstrează multe din proprietățile de simetrie ale orbitalilor atomici. De exemplu, funcția de undă Bloch u_s din banda de conducție are simetrie pară în toate cele trei direcții în interiorul fiecărei celule unitate,similar cu simetria sferică a orbitalului atomic s. De asemenea, u_z are simetrie impară de-a lungul axei z și simetrie pară de-a lungul celorlalte două direcții, în interiorul fiecărei celule unitate,similar cu orbitalul atomic p_z. Datorită simetriei impare în direcția z rezultă $<u_s|u_z>=0$; parantezele triunghiulare reprezintă integrala pe o celulă unitate. Dacă se acționează asupra lui u_z cu ajutorul operatorului p_z se inversează simetria de-a lungul lui z și prin urmare elementul de matrice al impulsului $<u_s|p_z|u_z>$ este în general diferit de zero. Pe această bază și a unor argumente similare se definesc următoarele relații de simetrie

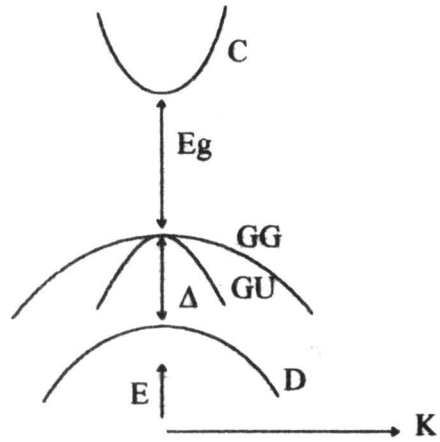


Fig. 2.4

$$< u_s|p_i|u_j >= 0, i \neq j$$
$$< u_s|\mathbf{p}|u_i >=< u_s|p_i|u_i >\equiv M$$
$$< u_s|\mathbf{p}|\bar{u}_i >= 0$$

unde i=x,y,z si u_i, $\bar{u}_i$ indică funcția cu spin sus și, respectiv,spin jos. Ultima relație se scrie pe baza faptului că funcțiile Bloch de spin opus nu interacționează între ele. Funcțiile Bloch u_{gg},u_{gu} și u_d se scriu ca o combinație liniară a funcțiilor de bază u_x.u_y,u_z. Deoarece în toate cele trei subbenzi există degenerare de spin, este necesar să definim șase funcții Bloch. Dacă vectorul de undă **k** al electronululi este orientat în direcția z, funcțiile de undă în subbenzile de valență se scriu

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$u_{gg} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(u_x + iu_y); \bar{u}_{gg} = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_x - iu_y)$$

$$u_{gu} = -\frac{1}{\sqrt{6}}(\bar{u}_x + i\bar{u}_y - 2u_z); \bar{u}_{gu} = \frac{1}{\sqrt{6}}(u_x - iu_y + 2\bar{u}_z) \qquad (4.1)$$

$$u_d = -\frac{1}{\sqrt{3}}(\bar{u}_x + i\bar{u}_y + u_z); \bar{u}_d = \frac{1}{\sqrt{3}}(u_x - iu_y - \bar{u}_z)$$

Pentru orientarea lui **k** în altă direcţie se definesc relaţii similare. Această combinaţie liniară ale funcţiilor de bază este cunoscută sub numele de reprezentarea dupa momentul unghiular. Ea este utilă atunci când se ia în considerare interacţia spin-orbită dintre momentul unghiular al orbitalului p şi momentul unghiular de spin al electronului;în această reprezentare termenul de interacţie spin-orbită este diagonal. In absenţa interacţiei spin-orbită subbanda D este degenerată cu subbenzile GG şi GU. Insă datorită interacţiei spin-orbită degenerarea este ridicată parţial,separându-se banda D de celelalte două cu energia Δ care în GaAs are valoarea de ~0,34 eV. In banda de valenţă, spre deosebire de banda de conducţie,trebuie să luam în considerare în mod explicit interacţiunea puternică dintre benzile degenerate. Luttinger si Kohn [5] au scris ecuaţiile masei efective pentru subbenzile degenerate, câte o ecuaţie pentru fiecare subbandă; cele două ecauţii sunt cuplate între ele prin introducerea unui termen de cuplaj. Pentru subbanda GG şi subbanda GU, degenerate în vecinătatea marginii benzii (Fig.2.4), deoarece se include şi degenerarea de spin se obţin patru ecuaţii ale masei efective cuplate între ele. Aceste patru ecuaţii pot fi simplificate utilizând o metodă propusă de Kane [6] şi dezvoltată de Broido şi Sham [7].Metoda constă în alegerea unei combinaţii liniare a celor patru funcţii Bloch u_{gg},u_{gu}, $\bar{u}_{gg}$, $\bar{u}_{gu}$,sub forma de alte patru noi funcţii Bloch notate u_A,u_B,u_C,u_D. Introducând aceste noi funcţii se decuplează cele patru ecuaţii în două seturi de ecuaţii cuplate identice şi rămân în continuare numai două ecuaţii cuplate de analizat. Insă această simplificare se face impunând unele restricţii,şi anume trebuie specificată direcţia k_{yz},iar ecuaţiile rămân complet generale numai pentru planele {100} si {110}. Aceste restricţii sunt minore pentru scopul urmărit în continuare. Cele două ecuaţii ale masei efective cuplate se scriu

$$(H_g+U)F_g+WF_u=E_vF_g$$

$$(H_u+U)F_u+W^*F_g=E_vF_u \qquad (4.2)$$

unde F_g si F_u sunt funcţiile anvelopă pentru golurile grele şi, respectiv, uşoare corespunzătoare noilor funcţii Bloch u_A şi u_B ce vor fi definite mai departe. W^* este conjugatul hermitic al lui W.W este termenul de cuplaj. Pentru a găsi valoarea energiei E_v cele doua ecuaţii se rezolvă simultan. Presupunând soluţiile sub formă de unde plane, Hamiltonienii H_g şi H_u se scriu

$$H_g = (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_x^2 - (\gamma_1 + \gamma_2)k_t^2$$

$$H_u + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_x^2 + (\gamma_1 - \gamma_2)k_t^2 \qquad (4.3)$$

unde

$$\gamma_1 - 2\gamma_2 \equiv \frac{\hbar^2}{2m_g}; \gamma_1 + 2\gamma_2 \equiv \frac{\hbar^2}{2m_u} \qquad (4.4)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

k_x și k_t sunt doi vectori perpendiculari,componente ale vectorului **k**,cu k_x orientat în direcția <100> și k_t de-a lungul unei direcții <100> sau <110> în planul k_y-k_z. Se observă că masa efectivă de-a lungul lui k_x este diferită de masa efectivă de-a lungul lui k_t. Termenul de cuplaj W are formă diferită atunci când k_t este orientat în direcția <100> față de cazul când este orientat în direcția <110>

$$W=\sqrt{3}\, k_t(\gamma_2 k_t - i2\gamma_3 k_x), \text{ pentru planele } \{100\}$$

$$W=\sqrt{3}\, k_t(\gamma_3 k_t - i2\gamma_3 k_x), \text{ pentru planele } \{110\} \qquad (4.5)$$

Conjugata hermitică se obține substituind în relațiile de mai sus pe i cu -i, independent dacă este sau nu complex k_x (nu se ia conjugata hermitică după k_x). Pentru k_t=0 termenul de cuplaj dispare și ecuațiile masei efective se decuplează. g_1,g_2,g_3 se numesc parametrii lui Luttinger pentru banda de valență. Pentru a găsi expresia generală a lui $E_v(\mathbf{k})$ în materialul masiv este convenabil să scriem ec. (4.2) ale masei efective sub forma matricială

$$\begin{bmatrix} H_g + U & W \\ W^* & H_u + U \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_g \\ F_u \end{bmatrix} = E_v \begin{bmatrix} F_g \\ F_u \end{bmatrix} \qquad (4.6)$$

In materialul masiv considerăm $U=U_o$=constant. In acest caz, având în vedere ec. (4.2)-(4.5) matricea Hamiltonianului (4.6) conține mărimi constante și poate fi rezolvată ușor. Rezultă

$$E_v(\mathbf{k}) - U_o = \frac{1}{2}\{H_g + H_u\} \pm \frac{1}{2}[(H_g - H_u)^2 + 4W^*W]^{1/2} \qquad (4.7)$$

Utilizând relațiile (4.2)-(4.5), $E_v(\mathbf{k})$ se poate exprima explicit in funcție de **k** în interiorul oricăruia din planele {100}

$$E_v(k) = \gamma_1(k_t^2 + k_x^2) \pm [4\gamma_2^2(k_x^2 + k_t^2)^2 + 12(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)k_x^2 k_t^2]^{1/2} \qquad (4.8)$$

Pentru simplitate am considerat U_o=0. O ecuație similară se gsește în planele {110}. Pentru k_x(sau k_t) pe direcția <100>,$g_2=g_3$, termenul de interacție dispare și se obține

$$E_v(k) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_o}(\gamma_1 - \gamma_2); J_x = \pm\frac{3}{2}$$
$$E_v(k) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_o}(\gamma_1 + 2\gamma_2); J_x = \pm\frac{1}{2} \qquad (4.9)$$

J_x este proiecția momentului cinetic total J pe direcția x. Deci pe direcția [100] masa golurilor grele este $m_o/(\gamma_1-2\gamma_2)$ iar masa golurilor ușoare este $m_o/(\gamma_1+2\gamma_2)$ în acord cu definiția (4.9) a parametrilor lui Luttinger. Prin urmare, masele efective de-a lungul lui k_x și k_t sunt identice în materialul masiv, în planele {100}. Pentru $E_g(\mathbf{k})$ și $E_u(\mathbf{k})$ cele două rădăcini ale ec.(4.6), vectorii proprii sunt dați de relațiile

$$\Psi_1(\mathbf{k},\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} F_g \\ F_u \end{bmatrix} = e^{i\mathbf{kr}} \begin{bmatrix} H_u + U_o - E_u \\ -W^* \end{bmatrix} \equiv e^{i\mathbf{kr}} \begin{bmatrix} \Delta_{1g}(\mathbf{k}) \\ \Delta_{1u}(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \qquad (4.10)$$

$$\Psi_2(\mathbf{k},\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} F_g \\ F_u \end{bmatrix} = e^{i\mathbf{kr}} \begin{bmatrix} H_u + U_o - E_u \\ -W^* \end{bmatrix} \equiv e^{i\mathbf{kr}} \begin{bmatrix} \Delta_{2g}(\mathbf{k}) \\ \Delta_{2u}(\mathbf{k}) \end{bmatrix}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Valabilitatea acestor ecuaţii se verifică direct prin substituţia în ec.(4.2b). Cu notaţia matricială fiecare soluţie se scrie

$$\Psi = F_g u_A + F_u u_B \tag{4.11}$$

Scrierea Hamiltonianului sub forma (4.3)-(4.5) implică soluţii sub forma de unde palne astfel că introducerea lor în această formă în (4.10) este obligatorie. Ecuaţia (4.11) reprezintă forma funcţiei de undă în notaţia vectorială. Funcţiile Bloch u_A şi u_B sunt ortogonale şi sunt definite de relaţiile

$$\begin{aligned} u_A &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha u_{gg} - \alpha^* u_{gg}) \\ u_B &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta \bar{u}_{gu} - \beta^* u_{gu}) \end{aligned} \tag{4.12}$$

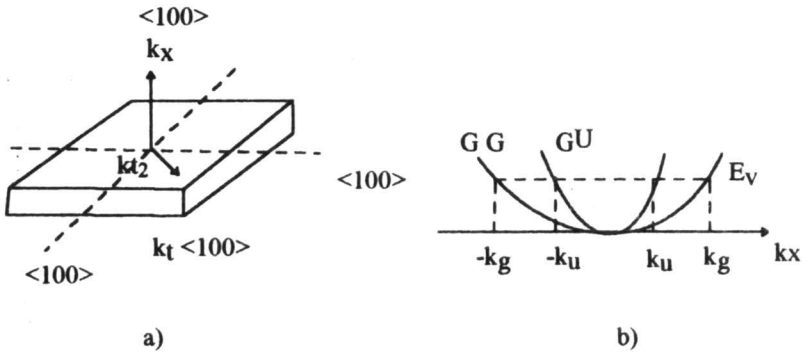


Fig. 2.5

Pentru planele {100}, $\alpha=\beta=1$, iar pentru planele {110} $\alpha=\exp[i3\pi/8]$ si $\beta=\exp[-i\pi/8]$. In continuare prezentăm rezultatele pentru valea cuantică de potenţial. Alegem direcţia văii cuantice de-a lungul axei x. In acest caz k_x este orientat de-a lungul axei de confinare şi k_t este transversal pe această diecţie şi este situat în planul văii aşa cum se reprezintă în Fig. 2.5. Din Fig. 2.5b rezultă că la o valoare dată a energiei există patru soluţii sub formă de unde plane.Soluţia generală, atât în regiunea văii cuantice de potenţial cât şi în cele doua regiuni ale barierelor adiacente văii (Fig.2.2) este o combinaţie liniară de aceste patru unde

$$\Psi = \sum A_\pm \Psi_1(\pm k_g, k_t, \mathbf{r}) + \sum B_\pm \Psi_2(\pm k_u, k_t, \mathbf{r}) \tag{4.13}$$

Sumarea se face pe undele progresive plus şi minus iar $k_{u,g}$ sunt definiţi in Fig.2.5b. $A_\pm$ si $B_\pm$ sunt patru constante necunoscute. Ecuaţia (4.13) pentru banda de valenţă este analogul ecuaţiilor (3.1)-(3.2) pentru banda de conducţie. Soluţia generală ψ este de asemenea un vector cu două componente. Cele două componente pot fi scrise astfel

$$\begin{aligned} F_g &= e^{ik_t r_t}[\sum A_\pm \Delta_{1g}(\pm k_g, k_t) e^{\pm ik_g x} + \sum B_\pm \Delta_{2g}(\pm k_u, k_t) e^{\pm k_u x} \\ F_u &= e^{ik_t r_t}[\sum A_\pm \Delta_{1u}(\pm k_g, k_t) e^{\pm ik_g x} + \sum B_\pm \Delta_{2u}(\pm k_u, k_t) e^{\pm ik_u x}] \end{aligned} \tag{4.14}$$

unde am scos în afară componenta transversală a undelor plane care este comună pentru amble tipuri de goluri. Prin urmare,spre deosebire de banda de conducţie unde avem numai doi coeficienţi necunoscuţi în fiecare regiune, în banda de valenţă avem câte patru coeficienţi

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

necunoscuţi în fiecare regiune: $A_{\pm}$ şi $B_{\pm}$.Pentru a găsi aceşti coeficienţi utilizăm condiţiile de frontieră pentru masa efectivă degenerată care implică egalarea urmatoarelor mărimi la cele două interfeţe

$$F_g \text{ si } \quad (\gamma_1 - 2\gamma_2)\frac{dF_g}{dx} + \sqrt{3}\gamma_3 k_t F_h \tag{4.15}$$

$$F_u \text{ si } \quad (\gamma_1 + 2\gamma_2)\frac{dF_u}{dx} - \sqrt{3}\gamma_3 k_t F_u \tag{4.16}$$

Dacă pentru orice valoare a lui k_t parametrii Luttinger sunt aceeaşi de ambele părţi ale unei interfeţe, a doua condiţie de frontieră se reduce la condiţia simplă de continutate a pantei (a derivatei) funcţiei de undă. Aceste condiţii de frontieră se aplică atât pentru planele {100} cât şi pentru planele {110}. A doua condiţie de frontieră se găseşte prin integrarea ec. (4.6) pe o grosime infinitezimală care traversează interfaţa. Prin aplicarea celor patru condiţii de frontieră la cele doua interfeţe se obţin în total opt ecuaţii. Există în fiecare din cele trei regiuni câte patru coeficienţi necunoscuţi şi deci în total 12. Insă, impunând funcţiei anvelopă condiţia să devină egală cu zero atunci când x tinde la infinit, rămân în total opt coeficienţi necunoscuţi. Prin urmare se obţin 8 ecuaţii omogene cu 8 necunoscute. Sistemul de ecuaţii are soluţie nebanală atunci când determinantul 8 × 8 este egal cu zero. Calculul se efectuează numeric. Pentru a găsi $E_v(k_t)$ se procedează astfel. (1) Se găseşte $E_v(0)$ pentru un nivel de energie GG sau GU particular, utilizând metoda convenţională prezentată în paragraful anterior. (2) Se creşte k_t şi se găseşte o nouă stare de energie.(3) se găseşte $k_{g,u}$ din cele doua relaţii $E_v(\mathbf{k})$ date de (4.8) în fiecare material; fiecare material are setul său propriu de parametri Luttinger şi valoarea proprie a lui U_o.(4) se evaluează D în fiecare material conform cu relaţiile de definiţie (4.10).(5) Se evaluează determinantul 8 x 8 al coeficienţilor. (6) Dacă determinantul nu este egal cu zero se utilizează metoda lui Newton de repetare a procesului până când se găseşte valoarea energiei pentru k_t dat(rădăcină a determinantului). (7) Se creşte k_t şi se repetă procesul până când se găseşte noua valoare a energiei, rădăcină a determinantului. Se poate găsi în acest mod intregul spectru $E_{vn}(k_t)$; pentru fiecare k_t valoarea energiei, rădăcină a determinantului, se găseşte după 2-3 iteraţii. In Fig.1.6 se reprezintă structura de benzi calculată astfel, pentru banda de valenţă a unei văi cuantice de potenţial GaAs-$Al_{0,2}Ga_{0,8}As$ cu adâncimea văii U_o ~95 meV. Se observă ridicarea degenerării, separarea nivelurilor golurilor grele (cu linie plina) de

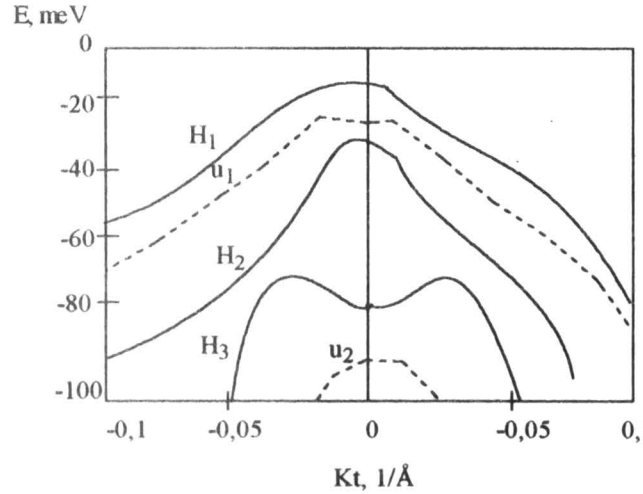


Fig. 2.6

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

nivelurile golurilor ușoare (cu linie întreruptă) [8]. Se determină de asmenea coeficienții $A_\pm$ și $B_\pm$ în fiecare regiune (vale și, respectiv, barieră a structurii) și se construiesc funcțiile Bloch utilizând ecuațiile (4.10).

2.5. *Valea cuantică de potențial de formă triunghiulară*

In dispozitivele electronice cu semiconductori se întâlneste în mod uzual valea cuantică de potențial de formă triunghiulară, în care U(x) depinde liniar de x pentru x>0 și este infinit (înălțimea infinită a barierei) pentru x=0.In acest caz ecuația Schrodinger pentru funcția anvelopă este de forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi_n(x)}{dx^2}+qFx\chi_n(x)=E_n\chi_n(x) \qquad (5.1)$$

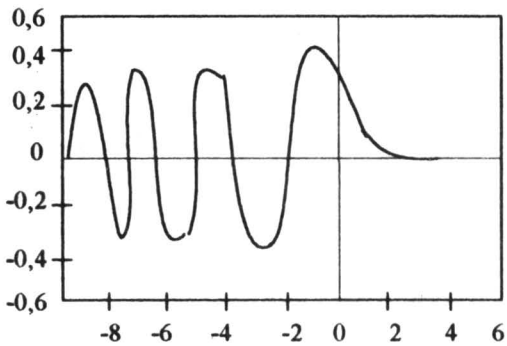


Fig. 2.7

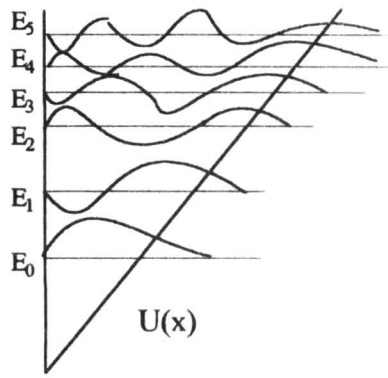


Fig. 2.8

Câmpul electric F este orientat în direcția x astfel că energia potențială U(x)=-(-q)Fx=qFx. Condiția de frontieră la x=0 este $\chi_n(0)=0$. Ecuația diferențială $\chi''-x\chi=0$ are două soluții independente dintre care una este nesingulară pentru $x\to\infty$ și este numită funcție Airy,A_i. Funcția Airy oscilează pentru x <0 și se apropie exponențial de valoare zero pentru $x\to\infty$ (Fig.2.7). Se verifică direct prin substitutie în ec.(5.1) ca funcția $A_i(\alpha+\beta x)$ unde $\alpha+\beta x=\left(\frac{2m}{\hbar^2q^2F^2}\right)^{1/3}(qFx-E_n)$ este o soluție a ecuației și are comportare corectă la $x\to\infty$. Din condiția de frontieră la x=0 se obțin valorile proprii ale energiei

$$E_n=-\left(\frac{q^2F^2\hbar^2}{2m}\right)^{1/3}a_n \qquad (5.2)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde a_n este al n-lea zero al functiei $A_i(x)$. Valoarea asimptotică a lui a_n , care poate fi utilizată cu bună aproximaţie şi pentru valori mici ale lui n, este

$$a_n \cong -\left[\frac{3\pi}{2}(n+\frac{3}{4})\right]^{2/3} ; n = 0,1,2,3,...$$

astfel că

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/3}\left[\frac{3\pi qF}{2}(n+\frac{3}{4})\right]^{2/3} \qquad (5.3)$$

Subbenzile de energie şi funcţiile de undă în valea de potenţial triunghiulară sunt reprezenetate în Fig.2.8. Notăm că valorile exacte ale lui (n+3/4) în ec.(5.3) pentru primele trei stări cele mai joase sunt 0,7587; 1,7540 şi 2,7525.O proprietate a funcţiilor Airy este ca distanţa medie de separare a purtătorilor din subbanda n, faţă de suprafaţă, definită de relaţia

$$< x_n >= \frac{\int xA_i^2(x)dx}{\int A_i^2(x)dx}$$

este $2E_n/3qF$, iar media lui $<x_n^2>$ este egală cu $(6/5)<x_n>^2$. In final prezentăm câteva proprietăţi ale funcţiilor Airy utilizate pentru obţinerea rezultatelor de mai sus

$$\int_x^\infty A_i^2(x)dx = -xA_i^2(x) + A_i'^2(x)$$

$$\int_x^\infty xA_i^2(x)dx = \frac{1}{3}[-x^2A_i^2(x) + xA_i'^2(x) - A_i(x)A_i'(x)]$$

$$\int_x^\infty x^2A_i^2(x)dx = \frac{1}{5}[-x^3A_i^2(x) + x^2A_i'^2(x) - 2xA_i(x)A_i'(x) + A_i^2(x)]$$

Aceste relaţii se verifică uşor dacă utilizăm proprietatea $A'_i(x)=xA_i(x)$ unde A_i' si A_i'' sunt prima şi a doua derivată a lui A_i în raport cu x. In evaluările de mai sus s-a luat ca limită inferioară a integralelor zero-ul (n+1) al funcţiei Airy multiplicat cu $(\hbar^2 / 2mqF)^{1/2}$ deoarece în acest caz rezultatele au o formă mai simplă. De asemenea,s-a ales ca origine a axei de coordonate x punctul de întoarcere ,unde energia cinetică este egală cu energia potenţială. Acest punct se găseşte la distanţa $x=E_n/qF$ faţă de punctul de la suprafaţă. Un calcul recent al stărilor electronice în valea triunghiulară de potenţial, utilizând metoda legăturii tari este prezentat în [9].

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

2.6. *Structura cu două văi cuantice de potențial*

Considerăm structura unidimensională reprezentată în Fig.2.9. Inălțimile barierelor 1,3,5 le notăm U_1, U_3, U_5. Lărgimea barierei 3 o notăm cu b iar lărgimile văilor de potential 2 și 4 le notăm cu a. Alegem originea axei Ox la jumătatea barierei 3. In regiunea 1 funcția $\chi(x)$ satisface ecuația Schrodinger

$$\chi'' - \kappa_1^2\chi = 0; \kappa_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_1 - E) \tag{6.1}$$

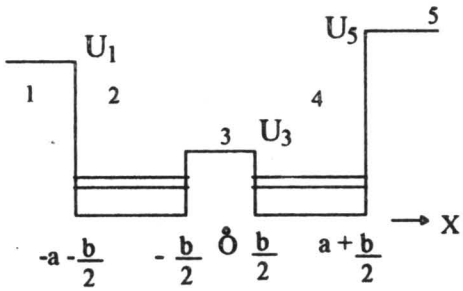


Fig. 2.9

Soluția generală a acestei ecuații diferențiale este

$$\chi_1(x) = A_1e^{\kappa_1 x} + B_1e^{-\kappa_1 x}; x < -a - \frac{b}{2} \tag{6.2}$$

In regiunea 2 funcția $\chi(x)$ satisface ecuația Schrodinger

$$\chi'' + k_2^2\chi = 0; k_2^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{6.3}$$

care are soluția

$$\chi_2(x) = A_2e^{ik_2x} + B_2e^{-ik_2x}; -a - \frac{b}{2} < x < -\frac{b}{2} \tag{6.4}$$

In regiunea 3 funcția $\chi(x)$ satisface ecuația Schrodinger

$$\chi'' - \kappa_3^2\chi = 0; \kappa_3^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_3 - E) \tag{6.5}$$

care are soluția

$$\chi_3(x) = A_3e^{\kappa_3 x} + B_3e^{-\kappa_3 x}; -\frac{b}{2} < x < \frac{b}{2} \tag{6.6}$$

In regiunea 4 funcția $\chi(x)$ satisface ecuatţa Schrodinger

$$\chi'' + k_4^2\chi = 0; k_4^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{6.7}$$

care are soluția

$$\chi_4(x) = A_4e^{ik_4x} + B_4e^{-ik_4x}; \frac{b}{2} < x < \frac{b}{2} + a \tag{6.8}$$

In regiunea 5 funcția $\chi(x)$ satisface ecuația Schrodinger

$$\chi'' - \kappa_5^2\chi = 0; \kappa_5^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_5 - E) \tag{6.9}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

care are soluţia

$$\chi_5(x) = A_5 e^{\kappa_5 x} + B_5 e^{-\kappa_5 x}; x > a + \frac{b}{2} \tag{6.10}$$

Impunând condiţia de continuitate funcţiei de undă şi primei sale derivate în raport cu x, împărţită prin masa efectivă, se obţine în final o relaţie între A_1,B_1 şi A_5,B_5 de forma [10]

$$\begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \tag{6.11}$$

unde

$$R = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix} \tag{6.12}$$

este o matrice cu două linii şi două coloane. Deoarece funcţia de undă trebuie să tindă la zero în regiunile 1 şi 5 este necesar ca pentru $|x| \to \infty$,B_1 si A_5 să fie egali cu zero. Din (6.11) se obţine

$$A_5 = R_{11} A_1 + R_{12} B_1$$

astfel că această condiţie conduce la ecuaţia $R_{11}=0$, deoarece A_1 este diferit de zero. Pentru a simplifica problema presupunem că în regiunile 1 şi 5 barierele sunt infinit de înalte. Deci structura pe care o studiem va fi formată din două văi de potenţial de aceeaşi lăţime şi aceeaşi adâncime, separate de o barieră de potenţial dreptunghiulară de înălţime finită şi mărginite de două bariere de potenţial infinit de înalte. Notăm $k_2=k_4=k$ si $\kappa_3=\kappa$. In aceste ipoteze simplificatoare ecuaţia $R_{11}=0$ devine

$$\begin{aligned} e^{2ika} &= -\frac{(e^{\kappa b} - e^{-\kappa b}) \pm 2i \sin 2\alpha}{e^{\kappa b} e^{-2i\alpha} - e^{-\kappa b} e^{i\alpha}} \\ a &= \arctan\left(\frac{m\kappa}{m_1 k}\right) \end{aligned} \tag{6.13}$$

m este masa efectivă a electronului în valea de potenţial şi m_1 este masa sa efectivă din barieră. Această ecuaţie permite determinarea valorilor posibile ale lui k şi deci ale energiei electronilor în structura studiată. Dacă neglijăm termenii în exp(-κb) în comparaţie cu cei în exp(κb) relaţia (6.13) devine

$$e^{2ika} = -e^{2i\alpha}[1 \pm e^{-\kappa b} 2i \sin\alpha] \tag{6.14}$$

Ec. (6.14) se poate rezolva utilizând netoda perturbaţiilor. Pentru U de ordinul zecimilor de eV şi b de ordinul nanometrilor, se poate folosi ca ecuaţie neperturbată ecuaţia

$$e^{2ika} = -e^{2i\alpha} \tag{6.15}$$

care are soluţia $2ka=2\alpha+2n\pi+\pi$, $n \in Z$ sau

$$ka = \alpha + n\pi + \pi/2 \tag{6.16}$$

Notăm cu k_o valorile lui k ce satisfac ecuaţia neperturbată (6.15), adică valorile lui k date de ec.(6.16)

$$k_o a = \alpha + n\pi + \pi/2$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Aceste valori ale lui k_o corespund stărilor discrete ale electronului într-o vale de potenţial mărginită de un perete infinit, deci sunt stările discrete din una din văile de potenţial ale structurii studiate. Valorile lui k ce satisfac ec.(6.14) vor fi de forma

$$k=k_o+\delta k \tag{6.17}$$

unde δk are valoare mică în comparaţie cu k_o. Substituind (6.17) în (6.14) se obţine

$$e^{2ia\delta k}e^{2ik_o a} \cong -e^{2i\alpha}(1 \pm e^{-\kappa b}2i\sin 2\alpha) \tag{6.18}$$

Având în vedere (6.15) und $k=k_o$, din (6.18) rezultă

$$e^{2ia\delta k} = 1 \pm e^{-\kappa b}\, 2i\sin 2\alpha \tag{6.19}$$

Deoarece δk a fost considerat că are valoare mică în comparaţie cu k se poate scrie $|2a\delta k| << 1$ şi $\exp(2ia\delta k)$ se poate dezvolta în serie astfel că ec.(6.19) devine

$$1+2ia\delta k \approx 1 \pm e^{-\kappa b}2i\sin 2\alpha$$

de unde se obţine

$$a\delta k = \pm \sin 2\alpha e^{-\kappa b} \tag{6.20}$$

Prin urmare, datorită interacţiunii dintre cele două văi de potenţial un nivel discret dintr-o vale de potenţial izolată, mărginită de un perete de potenţial finit şi de un perete infinit ,caracterizat de un vector de undă k_o, se despică în două niveluri discrete, despicarea fiind dată de ec.(6.20). Cele două niveluri vor fi dispuse simetric faţă de nivelul descris de k_o. Diferenţa dintre energiile corespunzătoare celor două niveluri discrete va fi

$$\delta E = \frac{\hbar^2 k\delta k}{m} \tag{6.21}$$

Prin extrapolare se poate trage concluzia că datorită interacţiunii dintre văile de potenţial, un nivel discret se despică în mai multe niveluri, al căror număr este egal cu numărul văilor de potenţial care interacţionează între ele. Acest fenomen este evidenţiat şi în cazul analizei efectului tunel printr-o structură cu mai multe bariere [11,2], precum şi prin experienţe de absorbţie optică. Despicarea nivelurilor se pune în evidenţă mult mai uşor utilizând metoda perturbatiei în cadrul aproximaţiei electronilor cuasilegaţi (numită şi aproximaţia legăturii tari). Cu scăderea grosimii barierei de potenţial dintre cele două văi funcţia exponenţială descrescătoare din barieră poate avea o valoare finită în valea vecină,aşa cum se reprezintă în Fig. 2.10. U_1 si U_2 sunt adâncimile celor două văi de potenţial iar χ_1 si χ_2 sunt funcţiile de undă neperturabate ale electronului în valea 1 şi,respectiv 2. Suprapunerea celor două funcţii de undă poate fi tratată ca o perturbaţie în fiecare din văi. Elementul de matrice al perturbaţiei pentru structura cu cele doua văi este

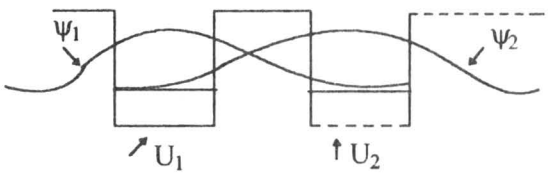


Fig. 2.10

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$U_{12}=\langle\chi_1|\,U_1(x)|\,\chi_2\rangle \;;\quad U^*_{12}=\langle\chi_2|\,U_1|\,\chi_1\rangle \tag{6.22}$$

Limitându-ne la baza funcţiilor χ_1 si χ_2 ecuaţia Schrodinger se poate scrie

$$\begin{pmatrix} E_1+U_{11}-E & U_{12} \\ U^*_{12} & E_1+U_{11}-E \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{6.23}$$

unde $U_{11}=\langle\chi_1|\,U_1(x)\chi_1\rangle=\langle\chi_2|\,U_2(x)|\,\chi_2\rangle$. S-au considerat cele două văi identice ($U_1(x)=U_2(x)$).

Sistemul de ecuaţii omogene are soluţie diferită de zero atunci când determinantul său este egal cu zero. Din această condiţie se obţine o ecuaţie care are soluţia $E=E_1+U_1\pm|U_{12}|$ şi deci cele două nivele identice se despică fiecare în câte două nivele separate prin mărimea $2|U_{12}|$ aşa cum se reprezintă în Fig. 2.9. Notăm că E_1 este nivelul de energie neperturbat în fiecare vale de potenţial. Prezentăm în continuare deducerea sistemului de ecuaţii (6.23). Când văile de potenţial (identice) sunt izolate, nivelul de energie $E_1=E_2$ este dublu degenerat deoarece electronul are acelaşi nivel de energie în fiecare vale de potenţial. Acest nivel de energie satisface ecuaţia Schrodinger în valea 1

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]\chi_1(x)=E_1\chi_1(x) \tag{6.24}$$

Se scrie o ecuaţie similară pentru nivelul E_2 din valea 2

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]\chi_2(x)=E_2\chi_2(x)$$

Deoarece $E_1=E_2$ vor exista două funcţii χ_1 si χ_2 pentru aceeaşi valoare a energiei, adică sistemul este degenerat. Atunci când văile sunt aduse aproape una de cealaltă, separate printr-o barieră de potenţial subţire, se vor influenţa între ele şi sitemul este perturbat (Fig.2.10). Conform principiului superpoziţiei o soluţie a problemei perturbate va fi o combinaţie liniară a celor două funcţii

$$\chi(x)=C_1\chi_1(x)+C_2\chi_2(x) \tag{6.25}$$

Scriem ecuaţia Schrodinger pentru această funcţie

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U_1(x)][C_1\chi_1(x)+C_2\chi_2(x)]=E[C_1\chi_1(x)+C_2\chi_2(x)]$$

Având în vedere ecuaţiile Schrodinger (6.24) pentru funcţiile χ_1 şi respectiv χ_2 din ultima ecuaţie se obţine

$$C_1E_1\chi_1+C_2E_1\chi_2+U_1(x)(C_1\chi_1+C_2\chi_2)=E(C_1\chi_1+C_2\chi_2) \tag{6.26}$$

In scrierea acestei ecuaţii s-a avut în vedere că $U_1(x)\equiv U_2(x)$ si $E_1\equiv E_2$. Inmulţind ec.(6.26) la stânga succesiv cu χ_1^* si χ_2^*, integrând pe întregul volum şi ţinând sema de condiţia de normare,se obţine sistemul de ecuaţii

$$C_1E_1+C_1\langle\chi_1|\,U_1(x)|\,\chi_1\rangle+C_2\langle\chi_1|\,U_1(x)|\,\chi_2\rangle=C_1E$$

$$C_2E_1+C_1\langle\chi_2|\,U_1(x)|\,\chi_1\rangle+C_2\langle\chi_2|\,U_1(x)_2\rangle=C_2E$$

Având în vedere notaţiile de mai sus acest sistem coincide cu sistemul (6.23)

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

2.7. *Superreţele*

Considerăm o structură multiplă de văi cuantice,separate de bariere de potenţial, periodică în direcţia x. De exemplu materialul A din care sunt construite văile de potenţial este GaAs iar materialul B din care sunt construite barierele este AlGaAs. Funcţia de undă a electronului în fiecare din materialele A si B este dată de expresia

$$\Psi_{A,B} = \sum_j F_j^{A,B}(x) u_{jo}^{A,B}(x) \tag{7.1}$$

unde $F_j(x)$ este o funcţie anvelopă uşor variabilă iar u_{jo} este partea periodică a funcţiei Bloch la k=0.Funcţia anvelopă F_j satisface teorema lui Bloch

$$F_j(x+nd)=\exp(iknd)F_j(x) \tag{7.2}$$

unde d=a+b este perioada superreţelei, a fiind lărgimea văii de potenţial iar b fiind lărgimea barierei. O a doua condiţie de frontieră este de forma

$$\frac{1}{m}\frac{dF_j^A}{dx} = \frac{1}{m_1}\frac{dF_j^B}{dx} \tag{7.3}$$

care este satisfacută la interfata dintre o vale şi o barieră ; m este masa electronului din valea de potenţial iar m_1 este masa electronului din bariera de potenţial. Luând funcţia anvelopă F ca o combinaţie liniară de unde plane cu vector de undă de semn opus în fiecare din cele două tipuri de straturi (vale şi barieră) şi utilizând condiţiile de frontieră (7.2) şi (7.3), pentru k_t=0, în aproximaţia benzilor parabolice se găseşte o relaţie de tip Kronig-Penney pentru determinarea valorilor lui k [1]:

$$\cos kd = \cos k_A a \cosh \kappa_B b - \frac{1}{2}(\frac{1}{\xi} - \xi)\sin k_A a \sinh \kappa_B b \equiv P \tag{7.4}$$

pentru stările legate, E<0,unde

$$k_A^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E; \kappa_B^2 = \frac{2m_1}{\hbar^2}(U_o - E)$$

U_o este înălţimea barierei de potenţial. De fapt $k \equiv k_x$ şi deoarece am considerat k_t=0, $E \equiv E_x$.In relaţiile de mai sus am omis indicele x atât de la k_A,k_B cât şi de la E. Dacă vectorul de undă transversal este diferit de zero,în aceste relaţii în locul lui E apare E_x=E-E_t. Zonele de energie permisă, numite minibenzi, corespund soluţiei ec. (7.4) cu k real. Poziţia minimului unei minibenzi cu număr par se determină din condiţia P(E_{on})=1 pentru k_y=k_z=0, pe când la maximul minibenzii, adică la $k=\pm\pi/d$,P(E_{on})=-1. Pentru minibenzile cu număr impar punctele k=0 corespund maximului energiei minibenzii iar punctele $k=\pm\pi/a$ corespund marginii inferioare a minibenzii. Pentru definirea maselor efective m_{xx},m_{yy},m_{zz}, la marginea inferioară a unei minibenzi se utilizează expresiile

$$m_{xx} = -\frac{\hbar^2}{d^2}\left(\frac{\partial P(E)}{\partial E}\right)_0; m_{ii} = -\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\partial P(E)}{\partial E}\right)_0 / \left(\frac{\partial^2 P(E)}{\partial k_i^2}\right)_0; i = y,z \tag{7.5}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Toate derivatele sunt definite la $E=E_o$, $k_y=k_z=0$ iar P(E) este membrul drept al ec.(7.4).Am scris energia în jurul minimului sub forma

$$E = E_x + E_t = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{xx}} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_{yy}} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{zz}}$$

Pentru scrierea concretă a funcţiilor de undă ale electronului în văile şi barierele de potenţial utilizate pentru deducerea relaţiei (7.4), indexăm parametrii din văile de potenţial cu 1 si 3 şi parametrii din bariera ce separă aceste două văi cu 2. Funcţia de undă F(x) în cele două văi este de forma

$$F_1=c_1\cos k_A x + c_2\sin k_A x,\ 0<x<a$$

$$F_3=c_5\cos k_A (x-d)+c_6\sin k_A (x-d), d<x<d+a$$

iar în barieră este

$$F_2=c_3\cosh\kappa_B (x-a)+c_4\sinh\kappa(x-a), a<x<d$$

Condiţiile de frontieră la x=a sunt

$$F_1 = F_2$$

$$\frac{1}{m}\frac{dF_1}{dx} = \frac{1}{m_1}\frac{dF_2}{dx}$$

şi la x=d

$$F_2 = F_3$$

$$\frac{1}{m}\frac{dF_2}{dx} = \frac{1}{m_1}\frac{dF_3}{dx}$$

La aceste condiţii se adaugă condiţia de periodicitate (7.2) F(x+d)=F(x)exp(ikd) din care rezultă $c_5=c_1\exp(ikd)$, $c_6=c_2\exp(ikd)$. In consecinţă se obţin patru ecuaţii cuplate pentru coeficienţii c_1,c_2,c_3 şi c_4. Din condiţia ca determinantul sistemului să fie egal cu zero se obţine ec.(7.4). Spre deosebire de modelul Kronig-Penney în această relaţie apare $\xi=m\kappa_B/m_1k_A$. Benzile de energie permise se găsesc din condiţia $-1\leq\cos kd\leq 1$. In Fig.2.11 este reprezentat un asemenea calcul pentru o superreţea în care a=b si U_o=0,4eV. Cu linie plină sunt

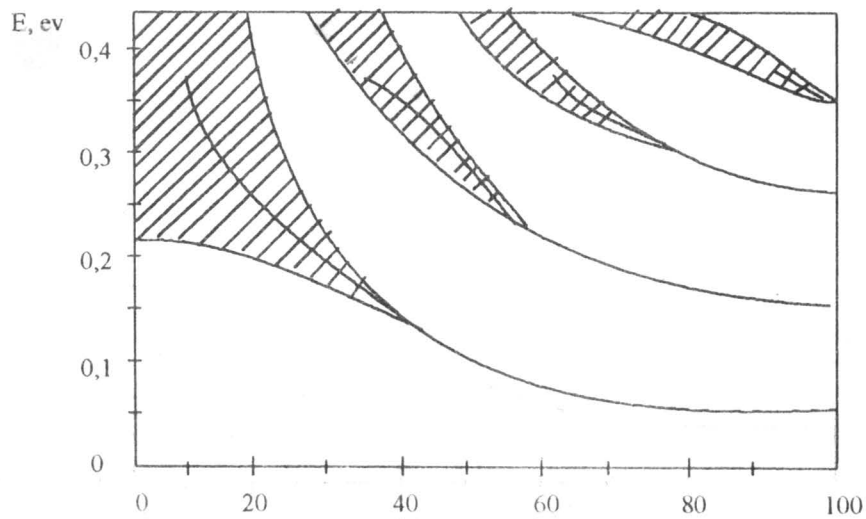


Fig. 2.11

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

reprezentate nivelurile discrete dintr-o singură vale de potenţial. Se observă că într-o superreţea un nivel discret devine o bandă de energie pentru o lărgime a văii (și a barierei) sub o anumită valoare. De asemeneea se observă că există bandă interzisă chiar deasupra barierei de potenţial[13]. Pentru $k_B b \to \infty$ rezultă din (7.4)

$$\cos k_A a - \frac{1}{2}(\frac{1}{\xi} - \xi)\sin k_A a = 0$$

care reprezintă ecuaţia pentru vectorul de undă dintr-o singură vale de potenţial. Pentru stările nelegate, E>0, se obţine soluţia

$$\cos kd = \cos k_A a \cos k_B b - \frac{1}{2}(\frac{1}{\xi} + \xi)\sin k_A a \sin k_B b \qquad (7.4a)$$

unde $k_B^2 = (2m_1/\hbar^2)(E - U_o)$.Ecuaţia (7.5) se rezolvă,ca și ec.(7.4) pe cale grafică.In relaţiile de mai sus, $k \equiv k_x$. Pentru banda de goluri, atunci când subbenzile sunt necuplate, se obţine o ecuaţie analoagă cu ec.(7.4) cu modificarea corespunzătoare a parametrilor. In cazul $k_t \neq 0$ situaţia este mai complexă și calculul se efectuează numeric[12]. Atunci când straturile (văii și barierei) sunt foarte subţiri (mai subţiri decât 6-8 strate atomice) nu se mai poate aplica metoda funcţiilor anvelopă ci se aplică metoda LCAO[12]. În continuare prezentăm rezultatele obţinute pentru structura de benzi a unei supereţele cu N văi de potenţial utilizând aproximaţia electronilor cuasilegaţi (a legăturii tari) [1], valabilă în cazul barierelor groase. In acest caz funcţia anvelopă de tip Bloch se ia de forma

$$F_j(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ik_x nd} \chi_j(x - nd) \qquad (7.6)$$

unde $\chi_j(x\text{-}nd)$ este funcţia din valea de potenţial centrată la x=nd. Presupunând interacţiunea numai între văile cele mai apropiate, se obţine pentru energia nivelului j expresia

$$E_j(k_x) = E_{jo} + S_j + 2T_j \cos k_x d \qquad (7.7)$$

unde

$$S_j = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_j(x-d) U(x) \chi_j(x-d) dx$$
$$T_j = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_j(x) U(x) \chi_j(x-d) dx \qquad (7.8)$$

unde E_{jo} este nivelul nedegenerat din valea de potenţial izolată. Se observă că un nivel se descompune într-o bandă de lărgime $4T_j$. In acest caz apare $4T_j$ deoarece o vale interacţionează în reţea cu două văi vecine.(In cazul structurii cu două văi de potenţial apare lărgimea $2U_{12}$ deoarece există interacţiune numai între două văi). Dependenţa de k_x a energiei în prima zonă Brillouin arată ca în Fig .2.12. Presupunând că sunt satisfăcute condiţiile de ciclicitate Born-von Karman se găseşte că vectorul de undă k_x poate lua numai valori discrete care sunt un număr întreg de $2\pi/Nd$. Deoarece cele 2N stări ale unui aceluiași nivel se dispersează într-o bandă, densitatea de stări a unei superreţele este diferită de cea a unei văi cuantice de potenţial. In Fig.2.13 se reprezintă dependenţa lărgimii unei benzi de energie (care conţine 2N stari) de lărgimea barierei pentru trei valori diferite ale lărgimii văii de potenţial:

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

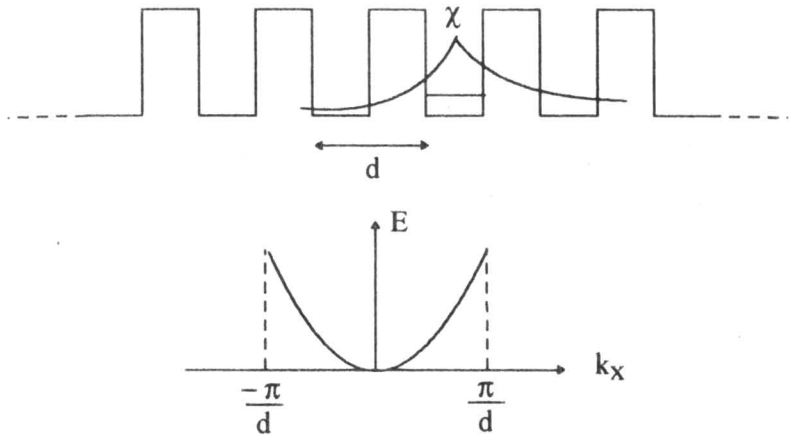


Fig. 2.12

a=3 nm (curba 1), a=5 nm(curba 2), a=20 nm(curba 3) pentru o superreţea din $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ cu U_o=212meV si x=0,2. Scriind energia totală

$$E_j(k_x,k_t)=\frac{\hbar^2k_t^2}{2m}+E_j(k_x)$$

se obţine pentru densitatea de stări expresia

$$g(E)=N\frac{m}{\pi\hbar^2}\arccos\left(\frac{E_j-E_{jo}-S_j}{2T_j}\right) \qquad (7.9)$$

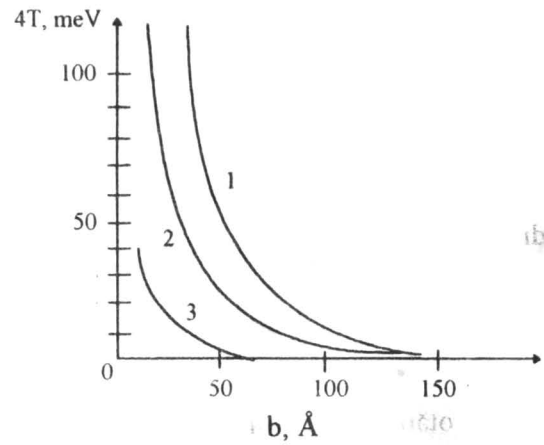


Fig. 2.13

Densitatea de stări a electronilor în superreţea este reprezentată în Fig.2.14 (curba SR). Pe acelaşi grafic sunt reprezentate pentru comparaţie densităţile de stări pentru cazuriule 2D si 3D. Relaţia (7.9) s-a obţinut sumând peste toate valorile lui k_x,densitatea de stări 2D corespunzând unei singure stări k_x. Se observă că densitatea de stări (7.9) prezintă două singularităţi la ambele extreme ale fiecărei benzi. Când lărgimea benzii tinde la zero, ceea ce are loc atunci când elementul de matrice, care conţine suprapunerea funcţiilor de undă,se anulează datorită creşterii lărgimii barierelor, densitatea de stări (7.9) tinde la densitatea de stări a N văi independente (2D).

Prezentăm în continuare deducerea relaţiei (7.7).Funcţia de undă (7.6) satisface ecuaţia Schrodinger

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x)]F(x)=E(k_x)F(x)$$

unde pentru simplitate am omis scrierea indicelui j. Inmulţim ambele părţi ale acestei ecuaţii la stânga cu F^* şi integrăm pe toată lărgimea superreţelei. Obţinem

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

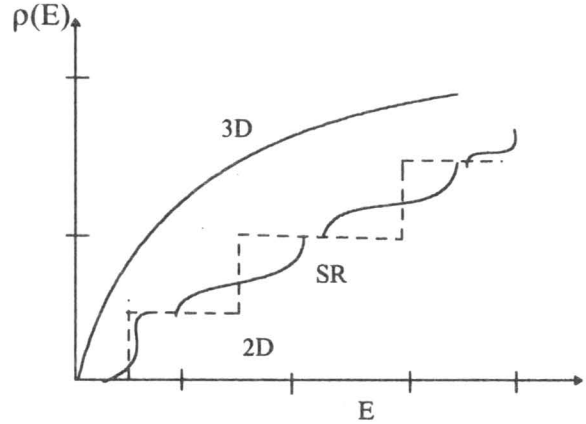


Fig. 2.14

$$E = \frac{\int F^*[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)]Fdx}{\int F^*Fdx} = E_o + \frac{\sum_m \sum_n e^{ik_x(n-m)d}\int \chi(x-md)U(x)\chi(x-nd)dx}{\sum_m \sum_n e^{ik_x(n-m)d}\int \chi(x-md)\chi(x-nd)dx} \qquad (7.10)$$

Deoarece toate văile (și barierele) sunt echivalente, atât numărătorul cât și numitorul nu depind de n sau m separat ci numai de diferența lor, adică de poziția relativă a văilor cuantice. Prin urmare, se poate considera m=0 și înlocui sumarea după m atât la numărător cât și la numitor cu factorul N, numărul de perioade ale superrețelei. Astfel,

$$E = E_o + \frac{\sum_n e^{ik_x nd}\int \chi(x)U(x)\chi(x-nd)dx}{\sum_n e^{ik_x nd}\int \chi(x)\chi(x-nd)dx} \qquad (7.11)$$

Presupunem inițial că funcția de undă χ a electronului din valea de potențial scade atât de rapid cu distanța încât se poate neglija suprapunerea funcțiilor de undă chiar între văile adiacente, adică

$$\int \chi(x)\chi(x-nd)dx = \delta_{on} = \begin{cases} 0, n \neq 0 \\ 1, n = 0 \end{cases}$$

Notăm integrala de la numaratorul fracției (7.11) pentru n=0 cu

$$\int \chi^*(x)U(x)\chi(x)dx = \int \chi^*(x-d)U(x)\chi(x-d)dx = S$$

unde am utilizat proprietatea de periodicitate a funcției de undă $\chi(x)=\chi(x-d)\exp(ikd)$. Deși inițial am neglijat suprapunerea funcțiilor de undă a două văi cuantice adiacente în continuare luăm în considerare această suprapunere numai la numărătorul fracției (7.11), notând $n \equiv n_o = \pm 1$ deoarece considerăm vecinătatea atât la dreapta cât și, la stânga unei văi cuantice. Notăm elementul de matrice al lui U între două văi cuantice adiacente

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$\int \chi(x)U(x)\chi(x-n_o d)dx = \int \chi(x)U(x)\chi(x-d)dx = \int \chi(x)U(x)\chi(x+d)dx = T$$

unde am considerat că are aceeași valoare între oricare din două văi cuantice adiacente. Cu aceste considerații relația (7.11) devine

$$E = E_o + S + T\sum_{n_o} e^{ik_x n_o d} = E_o + S + T(e^{ik_x d} + e^{-ik_x d}) = E_o + S + 2T\cos k_x d$$

ceea ce coincide cu expresia (7.7).

2.8. *Fenomene de tunelare*

Considerăm structura cu n bariere reprezentată în Fig. 2.15. Barierele sunt dreptunghiul are, de aceeași înalțime U_o,separate de văi de potențial de adâncime finită. Notăm poziția frontierei din stânga a primei bariere cu a iar poziția frontierei din dreapta acestei bariere cu L, astfel că L=a+b este perioada superrețelei, a este lărgimea văii și b este lărgimea barierei de potențial. Funcțiile de undă asociate electronului, soluții ale ecuației Schrodinger, sunt următoarele. In stânga barierei

$$F_s(x)=A_s e^{ikx}+B_s e^{-ikx} \tag{8.1}$$

în barieră

$$F(x)=Ae^{\kappa x}+Be^{-\kappa x} \tag{8.2}$$

la dreapta barierei

$$F_r(x)=A_r e^{ikx}+B_r e^{-ikx} \tag{8.3}$$

unde

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; U_o - E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_1}$$

Utilizăm condițiile de continuitate ale funcțiilor de undă și ale derivatelor acestora la x=a (pentru simplitate considerăm masa efectivă a electronului din valea de potențial m, egală cu cea din barieră, m_1)

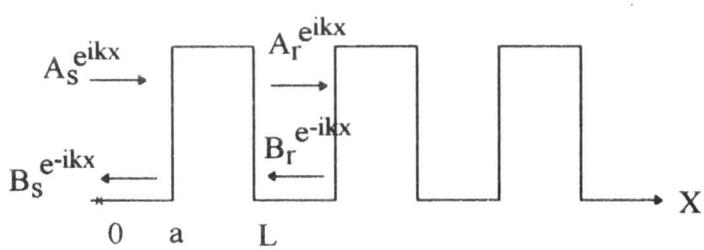


Fig. 2.15

$$F_s(a) = F(a); \left.\frac{dF_s}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{dF_r}{dx}\right|_{x=a} \tag{8.4}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

și la x=L

$$F(L) = F_r(L); \left.\frac{dF}{dx}\right|_{x=L} = \left.\frac{dF_r}{dx}\right|_{x=L} \tag{8.5}$$

Din ecuațiile (8.1), (8.2) si (8.4) se obține

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} e^{\kappa a} & e^{\kappa a} \\ e^{-\kappa a} & -e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ -\frac{ik}{\kappa}e^{ika} & \frac{ik}{\kappa}e^{-ika} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} A_s \\ B_s \end{pmatrix} \tag{8.6}$$

Din ec.(8.2),(8.3) și (8.5) se obține

$$\begin{pmatrix} A_r \\ B_r \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} e^{-ikL} & e^{-ikL} \\ e^{ikL} & -e^{ikL} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} e^{-\kappa L} & e^{\kappa L} \\ \frac{i\kappa}{k}e^{-\kappa L} & -\frac{i\kappa}{k}e^{\kappa L} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \tag{8.7}$$

Din (8.6) și (8.7) rezultă

$$\begin{pmatrix} A_r \\ B_r \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} (2\cosh\kappa b + i\frac{k^2-\kappa^2}{\kappa k}\sinh\kappa b)e^{-ikb} & -i\frac{k^2+\kappa^2}{\kappa k}\sinh\kappa b e^{-ik(L+a)} \\ i\frac{k^2+\kappa^2}{\kappa k}\sinh\kappa b e^{ik(L+a)} & (2\cosh\kappa b - i\frac{k^2-\kappa^2}{\kappa k}\sinh\kappa b)e^{ikb} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} A_s \\ B_s \end{pmatrix} \tag{8.9}$$

Utilizăm notațiile

$$k_o^2 = k^2 + \kappa^2 = \frac{2mU_o}{\hbar^2}; \tan\varphi = \frac{k^2-\kappa^2}{2\kappa k}\tanh\kappa b; \tag{8.10}$$

Pătratul modulului numărului complex

$$Z = 2\cosh\kappa b + i\frac{k^2-\kappa^2}{\kappa k}\sinh\kappa b$$

este

$$Z^2 = 4\cosh^2\kappa b + \frac{k^4+\kappa^4-2\kappa^2k^2}{\kappa^2k^2}\sinh^2\kappa b = 4[1+(\frac{k_o^2}{2\kappa k})^2\sinh^2\kappa b]$$

Deci,

$$|Z| = 2\sqrt{1+(\frac{k_o^2}{2\kappa k})^2\sinh^2\kappa b}$$

Ecuația (8.9) se poate scrie

$$\begin{pmatrix} A_r \\ B_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}|Z|e^{-i(kb-\varphi)} & (\frac{|Z|^2}{4}-1)^{1/2}e^{-i[k(L+a)+\frac{\pi}{2}]} \\ (\frac{|Z|^2}{4}-1)^{1/2}e^{i[k(L+a)+\frac{\pi}{2}]} & \frac{1}{2}|Z|e^{i(kb-\varphi)} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} A_s \\ B_s \end{pmatrix} \tag{8.11}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Această ecuaţie stabileşte relaţiile dintre amplitudinile funcţiilor de undă din dreapta şi din stânga barierei. Ea se poate scrie

$$\begin{pmatrix} A_r \\ B_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} A_s \\ B_s \end{pmatrix} \tag{8.12}$$

unde

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \tag{8.13}$$

se numeşte matrice de transfer. Dacă ne referim la o barieră singulară amplitudinea A_r o numim coeficient de transmisie prin barieră şi o notăm cu t. Deoarece în dreapta barierei (pentru o singură barieră) nu există unda reflectată,unda care să se propage în sensul negativ al axei x, rezultă că B_r=0.

Amplitudinea B_s o numim coeficient de reflexie şi o notăm cu r. Pentru simplitate, considerăm amplitudinea undei incidente A_s=1. Prin urmare, relaţia (8.12) se poate scrie

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \tag{8.14}$$

adică

$$t = S_{11} + rS_{12}$$
$$0 = S_{21} + rS_{22}$$

Acest sistem de ecuaţii are următoarele soluţii

$$r = -\frac{S_{21}}{S_{22}}; t = S_{11} - \frac{S_{21}S_{12}}{S_{22}} = \frac{\det S}{S_{22}} = \frac{1}{S_{22}} \tag{8.15}$$

deoarece detS=1, matricea S fiind o matrice hermitică;elementele simetrice in raport cu diagonala sunt complex conjugate şi determinantul ei este egal cu unitatea. Comparând (8.11) cu (8.12) se observă că $S_{11}=S_{22}^*$ şi deci $(1/S_{11})=t^*$. Probabilitatea de transmisie, sau transparenţa,

$$T = t^* t = \frac{1}{|S_{22}|^2} = |t|^2$$

şi prin urmare pentru tunelarea printr-o singură barieră se obţine

$$T_1 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{\kappa} + \frac{\kappa}{k}\right)^2 \sinh^2 \kappa b} \tag{8.16}$$

Din (8.15) se obţine S_{21}=-r/t. Deoarece $S_{12}^*=S_{21}$,se poate scrie $S_{12}=-r^*/t^*$ unde probabilitatea de reflexie $R=r^*r=|r|^2$. Din (8.15) se obţine R+T=1. Cu noile notaţii matricea de transfer se poate scrie

$$S = \begin{pmatrix} \frac{1}{t^*} & -\frac{r^*}{t^*} \\ -\frac{r}{t} & \frac{1}{t} \end{pmatrix} \tag{8.17}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Dacă substituim în expresiile lui F_s(8.1) si F_r(8.2) pe x cu x-L rezultă că matricea S_l a barierei deplasată cu L este dată de expesia

$$\mathbf{S}_L = \begin{pmatrix} e^{-ikL} & 0 \\ 0 & e^{ikL} \end{pmatrix} \mathbf{S} \begin{pmatrix} e^{ikL} & 0 \\ 0 & e^{-ikL} \end{pmatrix} \tag{8.18}$$

Matricea de transfer prin două bariere succesive este egală cu produsul celor două matrici

$$\mathbf{S}_2 = \mathbf{S}_L \mathbf{S} \tag{8.19}$$

unde s-a presupus că bariera 2 este așezată la dreapta barierei 1. Cele două bariere identice sunt separate prin distanța L. Având în vedere relațiile (8.17)-(8.19) se obține

$$\mathbf{S}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{t^{*2}} + e^{-2ikL}\left|\frac{r}{t}\right|^2 & -\frac{r^*}{t^*}\left(\frac{e^{-2ikL}}{t^*} + \frac{1}{t}\right) \\ -\frac{r}{t}\left(\frac{e^{2ikL}}{t} + \frac{1}{t^*}\right) & \frac{1}{t^2} + e^{2ikL}\left|\frac{r}{t}\right|^2 \end{pmatrix} \tag{8.20}$$

Termenul S_{22} din dreapta jos al acestei matrici ne dă coeficientul de transmisie

$$t_2 = \frac{1}{S_{22}} = \frac{t^2}{1 + \frac{t^2}{|t^2|}|r|^2 e^{2ikL}} = \frac{t^2}{1 + |r|^2 e^{2i(kL+\varphi_t)}} \tag{8.21}$$

unde $\phi_t = \phi - kb$ (ec. 8.11) iar tan ϕ este dată de relația (8.10). Probabilitatea de tunelare prin structura cu doua bariere este dată de expresia

$$T_2 = |t_2|^2 = \frac{T_1^2}{\left|1 + |r|^2 e^{2i(kL+\varphi_t)}\right|^2} = \frac{(1 - |r^2|)^2}{\left|1 + |r|^2 e^{2i(kL+\varphi_t)}\right|^2} \tag{8.22}$$

Pentru structura cu două bariere se obține transparența totală atunci când $2(kL+\phi_t)=(2n+1)\pi$. Având în vedere expresia lui tan φ (8.10) această condiție devine

$$\cot anka = \frac{1}{2}\left(\frac{k}{\kappa} - \frac{\kappa}{k}\right) \tag{8.23}$$

ceea ce coincide cu condiția de a avea o stare legată într-o vale de potențial de lărgime a situată între două bariere. Prin urmare, structura cu barieră dublă actionează ca un filtru, transmițând electronii de energie de rezonanță dată de relația (8.23).In [11] s-a găsit următoarea relație de recurență între probabilitățile de tunelare printr-o structură cu n bartiere

$$\frac{1}{T_n} = \frac{1}{T_1 T_{n-1}}\left[\left(1 - \sqrt{1-T_1}\sqrt{1-T_{n-1}}\right)^2 + 4\sqrt{1-T_1}\sqrt{1-T_{n-1}}\cos^2[kb - \varphi - (n-1)kL]\right] \tag{8.24}$$

Cititorul găsește deducerea detaliată a acestei relații in [2]. Calculele numerice efectuate pe structuri cu 1-6 văi cuantice de potențial utilizând relația (8.24) evidențiază faptul că probabilitatea de tunelare prezintă tot atâtea maxime câte văi cuantice conține structura în locul unui singur maxim din cazul unei singure văi cuantice, ceea ce confirmă și

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

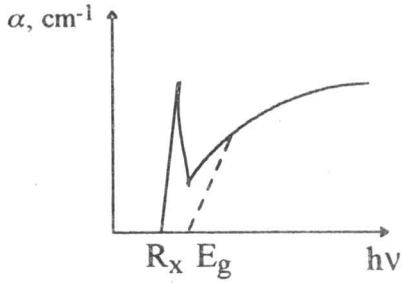


Fig. 2.16

pe această cale ca în structura cu n văi cuantice de potențial un nivel de energie se despică în n nivele. Se poate arăta că din studiul transparenței tunel se pune în evidență existența și lărgimea minibenzilor în superrețele. Condiția ca în superrețea să existe o stare permisă poate fi exprimată prin condiția ca matricea **S** a primei bariere să fie astfel încât funcția de undă cu coeficienții A_r și B_r (Fig.2.15) care vine în contact cu cea de a doua barieră să aibă aceeași amplitudine și aceeași fază relativă ca și funcția de undă din stânga primei bariere, adică

$$A_r e^{ikL} = A_s e^{i\phi}$$

$$B_r e^{-ikL} = B_s e^{i\phi} \qquad (8.25)$$

unde ϕ este o diferența de fază comună. Dacă această condiție nu ar fi satisfacută, amplitudinea funcției de undă ar crește indefinit atât cu creșterea cât și cu scăderea lui x ceea ce nu reprezintă o realitate fizică. Din (8.12),(8.17) si (8.25) se obține următorul sistem de ecuații omogene

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{t^*} - e^{i(\varphi - kL)} & -\frac{r^*}{t^*} \\ -\frac{r}{t} & \frac{1}{t} - e^{i(\varphi + kL)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_s \\ B_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (8.26)$$

care are soluție diferită de zero numai dacă determinantul sistemului este egal cu zero, de unde rezultă

$$e^{2i\varphi} - e^{i\varphi} \frac{2\,\mathrm{Re}(te^{ikL})}{|t|^2} + 1 = 0 \qquad (8.27)$$

care are soluția

$$e^{i\varphi} = \frac{\mathrm{Re}(te^{ikL})}{|t\,|^2} \pm \sqrt{\left(\frac{\mathrm{Re}(te^{ikL})}{|t|^2}\right)^2 - 1} \qquad (8.28)$$

Aceasta soluție este posibilă numai dacă

$$\mathrm{Re}(te^{ikL}) \le |t|^2$$

care mai poate fi scrisă

$$\cos(\varphi_t + kL) \le |t| \qquad (8.29)$$

unde am utilizat relația standard din mecanica cuantică $t = |t| \exp(i\phi_t)$ care rezultă din relațiile (8.11), (8.17). Deoarece $0 < |t| < 1$ vor exista benzi permise pentru valori ale lui k din jurul valorilor energiei pentru care este satisfacută condiția $\varphi_t + kL = \pi/2 + n\pi$. La $\phi_t + kL = n\pi$ apar benzile interzise. Lărgimea unei benzi permise creste in general cu apropierea lui $|t|$ de valoarea 1. Pentru energii situate peste înălțimea barierei benzile permise sunt largi și sunt separate de benzi interzise înguste.In incheierea acestui paragraf menționăm că stările

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

continue de energie (E>0) într-o vale cuantică de potenţial au de asemenea un efect important asupra particulelor incidente. Coeficienţii de transmisie şi de reflexie prezintă rezonanţă atunci când este satisfacută condiţia kL=nπ, la fel ca într-o cavitate Fabry-Perot. Particulele rămân mai mult timp în valea cuantică şi astfel pot fi captate pe nivele din aceasta. Tunelarea într-o superreţea din fire cuantice de grosime aleatorie este prezentată în [14].

2.9. *Excitonii*

Localizarea spaţială a electronilor şi golurilor în valea cuantică de potenţial determină o creştere considerabilă a efectelor excitonice în aceasta în comparaţie cu un cristal masiv. Astfel,efectele excitonice domină absorbţia optică şi luminescenţa în văile cuantice de potenţial chiar la temperatura camerei deoarece energia de legătură a excitonului este mult mai mare decât în cristalul masiv [15,16]. De asemenea efectele optice neliniare sunt mai intense[17]. Un cristal semiconductor ideal este transparent la radiaţia cu energia fotonilor mai mică decât lărgimea E_g a benzii interzise. Energia fotonilor la care începe să absoarbă cristalul radiaţia optică este un parametru caracteristic al său şi se numeşte marginea absorbţiei fundamentale. Proprietăţile optice în apropierea marginii absorbţiei fundamentale sunt puternic influenţate de faptul că electronul şi golul generaţi prin excitare interacţionează unul cu altul (interacţiune Coulomb) şi formează o stare numită exciton. Atracţia electron-gol determină stări legate la fel ca în atomul de hidrogen,cea mai joas stare legată având valoarea sub nivelul de energie din spectrul continuu (marginea inferioară a benzii de conducţie) egală cu un Rydberg efectiv R_y^* iar distanţa dintre electronul şi golul care formează excitonul este egală cu o raza Bohr efectivă a_B^*. Acestea au valorile

$$R_y^* \equiv E_i = \frac{\mu q^4}{32\pi^2\varepsilon^2\hbar^2} = \frac{\mu}{m_o}\frac{1}{\varepsilon_r^2}R_y; Ry = 13{,}6eV$$
$$a_B^* = \frac{4\pi\varepsilon\hbar^2}{\mu q^2} = \varepsilon_r\frac{m_o}{\mu}a_B; a_B = 0{,}0529nm \qquad (9.1)$$

unde $1/\mu=1/m_e+1/m_g$ este masa redusă a excitonului,m_e si m_g sunt masele efective ale electronului şi respectiv, golului, ε este permitivitatea cistalului. Funcţiile de undă asociate excitonului au simetria sferică a orbitalilor s ai atomului de hidrogen şi un set de numere cuantice asemenea atomului de hidrogen (n, l,").In cristalele cubice (de tipul diamantului şi blendei de zinc) există o bună concordanţă între această teorie şi rezultatele experimentale,în special în GaAs. Banda interzisă a GaAs la 2K este 1,5192eV. Această bandă interzisă corespunde excitaţiei electronului din marginea benzii Γ_8 la **k**=0 la marginea benzii Γ_6 la **k**=0. Atracţia Coulomb dintre acest electron şi golul rămas în banda de valenţă conduce la formarea unui exciton cu energia E_x=4,2meV[18]. Aşa cum se observă în Fig.2.16 acest exciton aduce o contribuţie importantă în spectrul de absorbţie la marginea benzii (maximul ascuţit R_x). In valea cuantică de potenţial, unde masele efective ale purtătorilor de sarcină sunt puternic anizotrope,excitonul 2D (bidimensional) are proprietăţile atomului de hidrogen 2D şi energia sa de legătură atunci când lărgimea văii $L<<a_B^*$, devine de patru ori mai mare decât a excitonului 3D. Hamiltonianul care descrie mişcarea excitonului într-o heterojoncţiune include barierele de potenţial, a electronului $U_e(x_e)$ şi golului $U_g(x_g)$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$H(\mathbf{k}_e,\mathbf{k}_g)=H_e(\mathbf{k}_e)+H_g(\mathbf{k}_g)+E_g-\frac{q^2}{4\pi\varepsilon r}+U_e(x_e)+U_g(x_g)$$

H_e si H_g sunt hamiltonienii efectivi (uniparticulă) pentru electron și, respectiv, gol, E_g este banda interzisă, $\mathbf{r}=\mathbf{r}_e-\mathbf{r}_g$ unde $\mathbf{r}_e$ este vectorul de poziție al electronului și $\mathbf{r}_g$ este vectorul de poziție al golului. Funcția de undă a excitonului satisface următoarele condiții de continuitate la frontierele x_1 și x_2 din partea stângă și din partea dreaptă a interfeței

$$F(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)\,\big|_{x_e=x_1}=F(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)\big|_{x_e=x_2}$$
$$F(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)\,\big|_{x_g=x_1}=F(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)\,\big|_{x_g=x_2}$$

In mod similar fluxul de particule satisface următoarele condiții de continuitate

$$\left|v_{xe}(\mathbf{k}_e)F\right|_{x_e=x_1}=\left|v_{xe}(\mathbf{k}_e)F\right|_{x_e=x_2}$$
$$\left|v_{xg}(\mathbf{k}_g)F\right|_{x_g=x_1}=\left|v_{xg}(\mathbf{k}_g)F\right|_{x_g=x_2}$$

$v_{xe,g}$ sunt proiecțiile pe axa x a vitezelor electronului și respectiv, golului

$$\mathbf{v}_e(\mathbf{k})=\frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}}H_e(\mathbf{k});\mathbf{v}_g(\mathbf{k})=\frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}}H_g(\mathbf{k})$$

Pentru benzi nedegenerate funcția de undă a excitonului se scrie sub forma unui produs de funcții

$$F_{sm}(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)=\chi_{sm}F(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)$$

unde χ_{sm} nu depinde decât de indicii s și m.Functia $F(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)$ poate fi scrisă

$$F(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)=e^{i\mathbf{k}_t\mathbf{R}_t}F(\rho,x_e,x_g)$$

unde $\mathbf{R}_t$ este coordonata centrului de masă al excitonului în planul (y,z) paralel cu interfețele,

$$\mathbf{R}_t=(m_{et}\mathbf{r}_{et}+m_{gt}\mathbf{r}_{gt})/m_t;\quad \boldsymbol{\rho}=\mathbf{r}_{et}-\mathbf{r}_{gt}$$

$F(\boldsymbol{\rho},x_e,x_g)$ satisface ecuația

$$(H_{oe}+H_{og}+H_{eg})F=(E-E_g-\frac{\hbar^2k_t^2}{2m_t})F$$
$$H_{oe}=-\frac{\hbar^2}{2m_{el}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U_e(x_e);H_{og}=-\frac{\hbar^2}{2m_{gl}}\frac{\partial^2}{\partial x_g^2}+U_g(x_g) \qquad (9.2)$$
$$H_{eg}=-\frac{\hbar^2}{2\mu_t}(\frac{\partial^2}{\partial\rho_y^2}+\frac{\partial^2}{\partial\rho_z^2})-\frac{q^2}{4\pi\varepsilon r}$$

$m_t=m_{et}+m_{gt}$ este masa mișcării de translație a excitonului în planul yz iar m_t este masa efectivă redusă. Energia de legătură a excitonului format din electronul din subbanda cea mai de jos

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

e1din banda de conducţie şi golul din subbanda cea mai de sus gl din banda de valenţă se determină din relaţia

$$E=E_{e1}+E_{g1}-\langle F|H_{oe}+H_{og}+H_{eg}|F\rangle \qquad (9.3)$$

unde E_{e1},E_{g1} sunt energiile electronului la marginea inferioară a subbenzii e1 şi respectiv, marginea superioară a subbenzii g1.

2.9.1. *Heterojoncţiuni de tip I. Benzi nedegenerate.*

Considerăm o vale de potenţial cuprinsă între două bariere de înălţime infinită (deci în valea cuantică se exclud $U_e(x_e)$ si $U_g(x_g)$ în ecuaţiile de mai sus). Presupunem masele efective ale electronilor şi golurilor m_e şi m_g izotrope.Intr-o vale largă, $a>>a_B^*$, se poate neglija distorsiunea mişcării interne a perechii electron-gol în exciton şi descrie starea sa prin funcţia de undă

$$F(\rho,x_e,x_g)=F(X)F(\mathbf{r}) \qquad (9.4)$$

Centrul de masă al excitonului este localizat pe axa x la

$$X=\frac{m_e x_e+m_g x_g}{m};m=m_e+m_g$$

$F(\mathbf{r})$ este funcţia de undă care descrie mişcarea relativă a electronului şi golului într-un material omogen. Funcţia de undă a excitonului în starea fundamentală este

$$F_{1s}(\mathbf{r})=(\pi a_B^{*3})^{-1/2}\exp(-r/a_B^*)$$

Utilizând condiţiile de frontieră $F(\pm a/2)=0$ se obţine pentru energia de excitaţie a excitonului 1s expresia

$$E_{1s}=E_g-E_i+\frac{\hbar^2k_t^2}{2m}+\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi}{a})^2 \qquad (9.5)$$

unde E_i este energia excitonului în cristalul masiv ideal dată de ec.(9.1) şi notată Ry, iar ultimul termen din (9.5) reprezintă energia de confinare a excitonului. In valea cuantică

$$E_{e1}=\frac{\hbar^2}{2m_e}(\frac{\pi}{a})^2;E_{g1}=\frac{\hbar^2}{2m_g}(\frac{\pi}{a})^2$$

şi energia de legătură în valea cuantică groasă

$$\varepsilon_{1s}=E_g-E_{1s}=E_i+\frac{1}{2}(\frac{\hbar\pi}{a})^2(\frac{1}{\mu}-\frac{1}{m}) \qquad (9.6)$$

In valea de potenţial subţire nu mai este valabilă aproximaţia (9.4) pentru funcţia de undă deoarece în acest caz confinarea purtătorilor în valea cuantică predomină asupra interacţiunii Coulomb. Dacă se rezolvă ec. (9.2) printr-o metodă variaţională se ia ca funcţie de încercare funcţia

$$F(\mathbf{r},x_e,x_g)=\chi_e(x_e)\chi_g(x_g)G(\rho,x)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde $x=x_e-x_g$ iar c_e si c_g sunt funcţiile proprii ale operatorilor H_{oe}, H_{og} (1.9).Se alege $G(\mathbf{r},x)$ pentru starea fundamentală a excitonului de forma [19]

$$G_{1s}(\rho,x)=C(1+\alpha x^2)e^{-\delta(\rho^2+x^2)^{1/2}}$$

unde α si δ sunt parametri variaţionali iar C este un factor de normare. Barierele, din stânga şi din dreapta văii cuantice, presează electronul şi golul unul către altul ceea ce determină creşterea interacţiunii Coulomb între acestea şi de asemenea, a energiei de legătură, care în cazul barierelor înalte variază de la valoarea E_i într-o vale largă la $4E_i$ pentru valea subţire $a<<a_B^*$ (cazul bidimen-sional). In cazul bidimensional funcţia de undă a excitonlui în starea fundamentală este dată de expresia

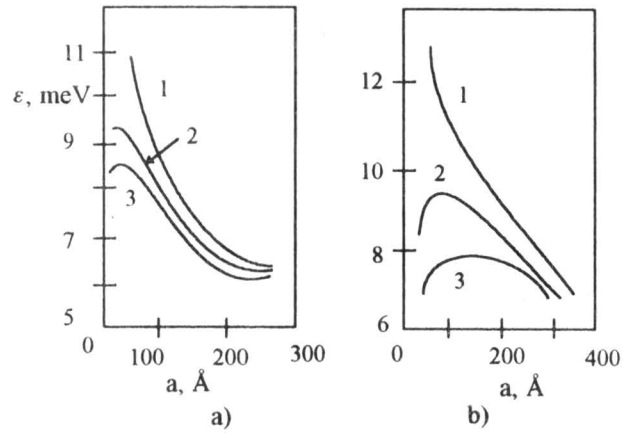


Fig. 2.17

$$F(\rho,x_e,x_g)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{4}{\alpha a_B^*}\cos\frac{\pi x_e}{a}\cos\frac{\pi x_g}{a}e^{-2\rho/a_B^*}, |x_{e,g}|<a/2\\ 0; |x_e|,|x_g|>a/2\end{cases} \qquad (9.7)$$

Pentru bariere de înălţime infinită energia de legătură a excitonului în valea cuantică de potenţial creşte monoton cu scăderea lui a aşa cum se reprezintă în Fig.2.17a pentru excitonul electron-gol greu şi în Fig. 2.17b pentru excitonul electron-gol uşor, curbele 1. Pentru bariere de înălţime finită energia de legătură a excitonului creşte cu scăderea lărgimii văii atinge un maxim şi apoi începe să scadă aşa cum se reprezintă în Fig.2.17 pentru structura $Al_xGa_{1-x}As$-GaAs-$Al_xGa_{1-x}As$ pentru x=0,3 (curbrle 2) si x=0,15 (curbele 3). Această scădere se datoreză faptului că pentru valori mici ale lui a legătura între electron şi gol în exciton este predominantă în regiunea barierei. Pentru văi foarte subţiri excitonul 1s poate fi considerat exciton tridimensional în zona barierei. Energia de legătură a acestui exciton este apropiată de cea a excitonului liber în materialul care formează bariera .

2.9.2. *Banda de conducţie nedegenerată,banda de valenţă degenerată.*

Considerăm o vale cuantică AlGaAs-GaAs-AlGaAs cu banda de conducţie nedegenerată şi banda de valenţă degenerată.Hamiltonianul efectiv pentru electron este dat de expresia

$$H_o(\mathbf{k})=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Hamiltonianul efectiv pentru goluri scris în forma matricială este dat de expresia

$$H(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} F & H & I & 0 \\ H^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -H \\ 0 & I^* & -H^* & F \end{bmatrix}$$

unde

$$F = -Ak^2 - \frac{B}{2}(k^2 - 3k_x^2); G = -Ak^2 + \frac{B}{2}(k^2 - 3k_x^2)$$

$$H = Dk_y(k_y - ik_z); I = \frac{\sqrt{3}}{2}B(k_y^2 - k_z^2) - iDk_yk_z$$

unde A, B, D sunt mărimi constante de material care sunt corelate cu parametrii lui Luttinger utilizaţi in paragraful 2.4 prin relaţiile

$$\frac{\hbar^2}{2m}\gamma_1 = -A; \frac{\hbar^2}{m}\gamma_2 = -B; \frac{\hbar^2}{m}\gamma_3 = -\frac{D}{\sqrt{3}}$$

Determinantul corespunzător al ecuaţiei $||H(\mathbf{k})-E||=0$ este dat de expresia

$$(E-F)(E-G)-|H|^2-|I|^2$$

Rădăcinile ecuaţiei $||H(\mathbf{k})-E||=0$ sunt

$$E_{1,2} = -Ak^2 \pm [B^2k^2 + C^2\sum_{i>j} k_i^2k_j^2]^{1/2}$$

unde $C^2=D^2-3B^2$. Semnul plus corespunde golurilor uşoare iar semnul minus, golurilor grele. Funcţiile care diagonalizează $H(\mathbf{k})$ sunt de forma

$$F_{1j} = [(E_i - F)(E_i - E_j)]^{-1/2} \begin{bmatrix} H \\ E_i - F \\ 0 \\ I^* \end{bmatrix}$$

$$F_{2j} = [(E_i - F)(E_i - E_j)]^{-1/2} \begin{bmatrix} -I \\ 0 \\ -(E_i - F) \\ H^* \end{bmatrix}$$

unde $i=1,2; j\neq i$. Funcţia de undă anvelopă $F_{sm}(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)$ poate fi scrisă ca un produs dintre un spinor χ_s şi o funcţie scalară $F_m(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)$

$$F_{sm}(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)=\chi_s F_m(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Funcţia de undă $F_m(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)$ poate fi scrisă sub forma unei coloane cu patru componente $F(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)$. Pentru calculul stărilor excitate Hamiltonianul efectiv pentru goluri poate fi descompus într-o sumă de un hamiltonian diagonal şi unul nediagonal

$$H_g(\mathbf{k})=H_d(\mathbf{k})+H_{nd}(\mathbf{k})$$

Intr-o bază canonică

$$H_d(\mathbf{k}) = P(\mathbf{k})\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + G(\mathbf{k})\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$H_{nd}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} 0 & H & I & 0 \\ H^* & 0 & 0 & I \\ I^* & 0 & 0 & -H \\ 0 & I^* & -H^* & 0 \end{bmatrix}$$

Scriem pe P si G definite mai sus sub altă formă

$$P(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{lg}} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_{tg}}; G(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{lu}} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_{tu}}$$

unde pentru $D=\sqrt{3}\,B$

$$\frac{\hbar^2}{2m_{lg}} = -(A-B); \qquad \frac{\hbar^2}{2m_{lu}} = -(A+B) \tag{9.8}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_{tg}} = -(A+\frac{B}{2}); \qquad \frac{\hbar^2}{2m_{tu}} = -(A-\frac{B}{2})$$

In aproximaţia zero în H_{nd} se obţine

$$F(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g) = e^{i\mathbf{k}_t\cdot\mathbf{R}_t} F(r,x_e,x_g)\mathbf{F}^{(m)}$$

unde $\mathbf{F}^{(m)}$ este o coloană cu componentele $F_{m\%}^{(m)}=d_{mm\%}$ şi funcţia $F(r,x_e.x_g)$ satisface ec.(9.2) unde pentru masa efectivă a golurilor se ia m_{lg},m_{tg} pentru numărul cuantic magnetic $m=\pm 3/2$ si m_{lu},m_{tu} pentru $m=\pm 1/2$. Indicele l se referă la masa longitudinală, indicele t la masa transversală,indicele u la goluri uşoare iar indicele g la goluri grele.In ecuaţia pentru $F(\mathbf{r},x_e,x_g)$ în locul energiei Coulomb $-q^2/er$ se poate substitui energia Coulomb pentru particule bidimensionale $-q^2/er$ considerând ca operator de perturbaţie

$$H' = H_{nd}(\mathbf{k}_g) + \frac{q^2}{4\pi\varepsilon}(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{r})$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

In aproximaţia de ordinul zero Hamiltonianul permite separarea variabilelor x_e, x_g, r funcţiile proprii fiind de forma

$$F(\rho, x_e, x_g) = \chi_e(x_e)\chi_g(x_g)G(\rho) \tag{9.9}$$

unde G(r) este funcţia proprie a excitonului bidimensional care descrie stările discrete şi stările din continuu. Pentru stările discrete caracterizate de o pereche de numere cuantice n=1,2,“ şi l=0,±1,±2,..se obţine

$$\varepsilon_{n,l} = \frac{E_i}{(n-\frac{1}{2})^2}$$

$$G_{n,l} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi} R_{nl}^{2D}(\rho) \tag{9.10}$$

$$R_{nl}^{2D}(\rho) = N_{n,|l|} \exp(-\xi_n)(2\xi_n)^{|l|} L_{n+|l|-1}^{2|l|}(2\xi_n)$$

$$\xi_n = \frac{1}{n-\frac{1}{2}} \frac{\rho}{a_B^*}$$

$L_n^{\alpha}(\xi)$ este polinomul Laguerre asociat şi $N_{n,|l|}$ este un factor de normare. Utilizând setul de funcţii de forma (9.9) se pot determina funcţiile proprii ale excitonului luând în considerare mixarea (hibridizarea) stărilor de goluri grele şi goluri uşoare, adică stările cu m=±3/2 şi m=±1/2.

2.9.3. *Superreţele.*

Starea electronului liber într-o heterostructură periodică este caracterizată de un număr cuantic în plus (faţă de cazul văii cuantice) şi anume,componenta longitudinală a vectorului de undă k_x[20]

$$F_{sm}(\rho, x_e + d, x_g + d) = e^{ik_x d} F_{sm}(\rho, x_e, x_g) \tag{9.11}$$

Ne vom mărgini la starea fundamentală a excitonului (n=1) pentru $k_t = k_x = 0$ într-un semiconductor cu benzi nedegenerate. Intr-o superreţea cu perioada mică, având deci lărgimea mare a minibenzilor, funcţia $F(r, x_e, x_g)$ in (9.11) poate fi dezvoltată după stările a două particule în minibanda

$$F(\rho, x_e, x_g) = \sum_k G_k \chi_{vk}^e(\mathbf{r}_e)\chi_{v',-k}^g(\mathbf{r}_g) \tag{9.12}$$

unde $\chi^{e,g}$ este funcţia anvelopă super-Bloch a electronului sau golului. Funcţia de undă super-Bloch are următoarea proprietate

$$\chi_{v,k}(\mathbf{r}) = e^{ik.r} u_{nk}(x);\ u_{nk}(x+d) = u_{nk}(x)$$

Pentru calculul stării fundamentale a excitonului într-o supereţea cu perioada mică prin metoda variaţională s-a utilizat următoarea funcţie de încercare [21]

$$F(\rho, x_e, x_g) = Ce^{-\rho/\lambda} \sum_{k_x} e^{-k_x^2/2\beta^2} \chi_{k_x}^e(x_e)\chi_{k_x}^g(x_g) \tag{9.13}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde

$$\chi_{k_x}^{e,g}(x) = e^{ik_x x} u_{l,k_x}^{e,g}(x, k_t = 0)$$

Funcţia (9.13) se obţine din (9.12) atunci când se neglijează depenedenţa de k_t a amplitudinii super-Bloch si G_k este aleasă astfel

$$G(\rho, k_x) = \sum_{k_t} G_k e^{ik_t \rho} = Ce^{-\rho/\lambda} e^{-\beta^2 x^2/2}$$

Funcţia G(r,x) descrie mişcarea relativă a electronului şi golului şi poate fi calculată utilizând aproximaţia masei efective. Această funcţie satisface următoarea ecuaţie Schrodinger

$$[-\frac{\hbar^2}{2\mu_t}(\frac{\partial^2}{\partial\rho_y^2} + \frac{\partial^2}{\partial\rho_z^2}) - \frac{\hbar^2}{2\mu_l}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{q^2}{4\pi\varepsilon r}]G(\rho, x) = -EG(\rho, x) \qquad (9.14)$$

$\mu_{l,t}$ este masa efectivă longitudinală şi respectiv,transversală a perechii electron-gol. Pentru excitonul e1-gg1 în superteţeaua GaAs/AlGaAs se poate neglija tunelarea golului prin barieră, masa longitudinală a golului m_{lg} este mare şi m_l coincide practic cu masa longitudinală a electronului m_{le} care este dată de expresia (7.5). Pentru masa transversală μ_t se obţine în acest caz

$$\mu_t = \frac{m_{et} m_{gt}}{m_{et} + m_{gt}}$$

unde m_{et} se calculează de asemenea prin metoda Kronig-Penney cu ajutorul relaţiei (7.5). Având în vedere relaţiile (9.8) şi neglijând mixarea golurilor grele şi uşoare în excitonul e1-gg1, se obţine

$$\frac{1}{m_{gt}} = -\frac{2}{\hbar^2}(A + \frac{B}{2}) = \frac{1}{4}(\frac{3}{m_u} + \frac{1}{m_g})$$

unde m_u si m_g sunt masele efective ale golurilor uşoare şi,respectiv,grele în materialul masiv. Energia de legătură se calculează utilizând relaţia (9.3).Pentru o structură multiplă de văi cuantice, adică pentru o superreţea cu bariere groase, este valabilă aproximaţia legăturii tari în care caz funcţia de undă a excitonului în superreţea F_{SR} se poate exprima în funcţie de funcţia de undă a excitonului într-o singura vale cuantica F_{SV}

$$F_{SR}(\rho, x_e, x_g) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l F_{SV}(\rho, x_e - x_l, x_g - x_l)$$

unde x_l este centrul văii l iar N este numărul de perioade in SR. Pentru $k_x \neq 0$, trebuie introdus sub sumă termenul $\exp(ik_x x_l)$. In Fig.2.18 se reprezintă energia de legătură a excitonului e1-gg1 într-o superreţea $GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ în funcţie de perioada d a SR[21].

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

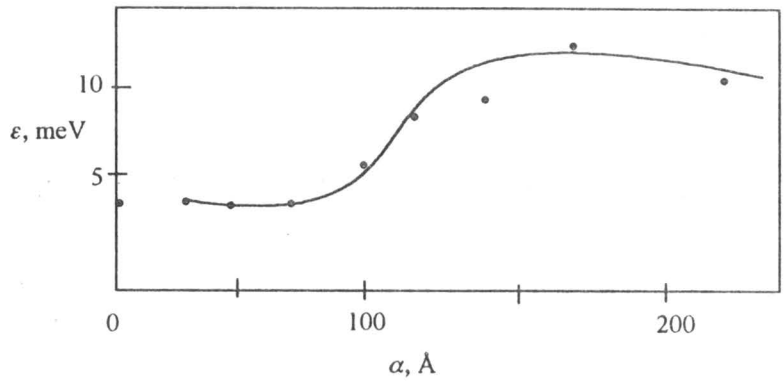


Fig. 2.18

2.9.4. *Heterojoncțiuni de tip II.*

Până acum ne-am referit la excitonii în heterostructurile de tip I in care atât valea cuantică pentru electroni cât și valea cuantică pentru goluri se găsesc în același strat subțire. In continuare ne referim la heterojoncțiunile de tip II în care în același strat se găsește valea cuantică pentru electroni și bariera pentru goluri iar în stratul adiacent, viceversa, adică valea cuantică pentru electroni este separată de către interfață de valea cuantică pentru goluri. Să considerăm valea de potențial pentru electroni și bariera de potențial pentru goluri dintr-un strat $|x| < a/2$. Funcția de undă a excitonului $F(\mathbf{r}_e,\mathbf{r}_g)$ are maxime la valorile lui x_e și x_g de lângâ frontierele $x=\pm a/2$. Dacă barierele, atât pentru electroni cât și pentru goluri, sunt infinit de înalte, în cazul calculului variațional al energiei de legătură funcția de încercare se ia de forma

$$F(\boldsymbol{\rho}, x_e, x_g) = C\chi_e(x_e)h(x_e)g(x_g)G(\boldsymbol{\rho},x)$$

unde $\chi_e(x_e)$ este definită în (9.6a) iar

$$h(x) = \exp[-\beta(\frac{a}{2} - x)]$$

$$g(x) = \begin{cases} (x - \frac{a}{2})\exp[-\beta_g(x - \frac{a}{2})]; & x > \frac{a}{2} \\ 0; \quad x < a/2 \end{cases}$$

funcția de undă a stării fundmentale a excitonului $G(\boldsymbol{\rho},x)$ se ia de forma

$$G(\rho, x) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_1 a_2^2}} \exp[-(\frac{\rho^2}{a_1^2} + \frac{x^2}{a_2^2})^{1/2}]$$

unde a_1 și a_2 sunt parametri variaționali. Cu asemenea alegere energia excitonului depinde de patru parametri variaționali a_1,a_2,β_e,β_g iar funcția $F(\boldsymbol{\rho},x_e,x_g)$ atinge valori maxime la $x_e=a/2-1/\beta_e$ și $x_g=a/2+1/\beta_g$. Energia se calculează cu ajutorul relației (9.3). Studiul energiei excitonilor în valea cuantică triunghiulară este prezentat în [22] iar în structura cu două văi cuantice (rectangulare) cuplate este prezentată în [23].

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

2.10. *Niveluri de impurităţi în valea cuantică de potenţial*

Considerăm impurităţi care dau nivele donoare puţin adânci în valea cuantică de potenţial şi că o impuritate dă un singur nivel donor. Pentru a determina funcţia de undă şi energia E a nivelului donor putin adânc se utilizează ca şi în cazul tridimensional, aproximatia masei efective. In acest scop se rezolvă ecuaţia

$$[H_o(\mathbf{k},x) - \frac{q^2}{4\pi\varepsilon|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|} + U(x)]F = EF \qquad (10.1)$$

unde H_o este Hamiltonianul efectiv al electronului în semiconductorul omogen, ε este constanta dielectrică, $\mathbf{r}_i$ este poziţia centrului de impuritate; axa x este perpendiculară pe stratul subţire (pe interfeţe). Pentru simplitate considerăm că straturile văii şi barierei au aceeaşi constantă dielectrică şi deci în ec. (10.1) nu am introdus contribuţia forţei imagine. U(x) este înălţimea barierei. Considerăm că banda de conducţie este nedegenerată şi electronul este caracterizat de masa efectivă izotropă m. Pentru rezolvarea ec.(10.1) pentru un centru de impuritate situat în valea de potenţial se foloseşte în mod obişnuit o metodă variaţională cu o funcţie de probă de forma

$$F(\mathbf{r}) = \chi_v(x)G(\rho x) \qquad (10.1a)$$

unde $\chi_v(x)$ este functia proprie a operatorului $H_o(\mathbf{k},x)+U(x)$ în subbanda n pentru $k_t=0$.In cazul înălţimii infinite a barierei de potenţial, soluţiile pare şi impare χ_v sunt definite de ecuaţiile

$$\chi = c_1 \cos kx, \quad k=(\pi/a)(2n+1)$$

pentru stările pare şi

$$\chi = c_1 \sin kx, \quad k=(\pi/a)2n$$

pentru stările impare. Pentru o vale rectangulară de lărgime a $\chi(x)$ are o anumită paritate în raport cu reflexia într-un plan care trece prin centrul vaii cuantice. Pentru $G(\rho,x)$ se alege o formă acceptabilă pentru procedeul de calcul variaţional şi astfel ca să se anuleze pentru $r\rightarrow\infty$.$\mathbf{r} = \mathbf{r}_t - \mathbf{r}_{it}$ adică este componenta în plan a vectorului $\mathbf{r}-\mathbf{r}_i$.In cazul cel mai simplu al unei stări 1s a unui donor neutru, această funcţie se poate lua sub forma

$$G(\rho,x) = C\exp[-|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|/\lambda]$$

unde λ este un parametru variaţional. Pentru starea fundamentală a unui electron localizat în subbanda n=1 se scrie

$$F(x) = \begin{cases} C\sqrt{\frac{2}{\pi}}\cos\frac{\pi x}{a}\exp\left\{-\frac{1}{\lambda}[\rho^2+(x-x_i)^2]^{1/2}; \right. & \left. |x| < \frac{a}{2}\right\} \\ 0 \qquad |x| > \frac{a}{2} \end{cases} \qquad (10.2)$$

Din condiţia de normare la unitate a lui F(x) se obţine

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$C^2 = \frac{1}{\lambda^3}[1 \cosh(\frac{2x_i}{\lambda})e^{-a/\lambda} + \frac{\cos 2k_1x_i}{(1+k_1^2\lambda^2)^2} + (\frac{1}{(1+k_1^2\lambda^2)^2} - \frac{a}{2\lambda}\frac{k_1^2\lambda^2}{1+k_1^2\lambda^2})e^{-a/\lambda}\cosh(\frac{2x_i}{\lambda}) + \frac{k_1^2\lambda^2}{1+k_1^2\lambda}\cdot\frac{x_i}{\lambda}e^{-a/\lambda}\sinh\frac{2x_i}{\lambda}]^{-1} \quad (10.3)$$

unde $k_1 = \pi/a$.Energia stării (10.2) a electronului este[2]

$$E(\lambda,a,x_i) = \langle F|H|F\rangle = \frac{\hbar^2k_1^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} - \frac{q^2C^2\lambda^2}{\varepsilon}(1 + \frac{\cos 2k_1x_i}{1+k_1^2\lambda^2} - \frac{k_1^2\lambda^2}{1+k_1^2\lambda^2}e^{-a/\lambda}\cosh\frac{2x_i}{\lambda}) \quad (10.4)$$

Ecuaţia pentru λ se găseşte din condiţia de minim a energiei

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}E(\lambda,a,x_i) = 0$$

În continuare considerăm trei cazuri limită: (1) $a \gg \lambda, |x_i| \ll a$;(2) $a \gg a_B^*, |x_i| = a/2$;(3) $a \ll a_B^*, |x_i| < a/2$.

Cazul 1.$a \gg \lambda; |x_i| \ll a$. In acest caz funcţia F(x) se reduce la functţa hidrogenoidă a unui donor neutru în cristalul tridimensional. Considerând în (10.2)-(10.4) $\cos k_1x$, $\cos k_2x \to 1$ si $\exp(-a/\lambda) \to 0$ se obţine o funcţie hidrogenoidă

$$F(\mathbf{r}) \to F_{1s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi\lambda^3}}e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|/\lambda} \quad (10.5)$$

unde

$$\lambda = a_B^* = \frac{4\pi\varepsilon\hbar^2}{mq^2}; E = -E_i = -\frac{mq^4}{32\pi^2\varepsilon^2\hbar^2}$$

Pentru $m=0{,}067m_o$, $\varepsilon=13$ se obţine pentru raza Bohr $a_B^*=10{,}27$ nm si $E_i=5{,}4$ meV.

Cazul 2.$a \gg a_B^*, |x_i| = a/2$. Dacă centrul de impuritate se află situat la interfaţa,atunci pentru bariere infinit de înalte funcţiile proprii într-o vale cuantică largă coincid cu funcţiile proprii $F(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)$ pentru semiconductorul omogen care se anulează la frontiera $x=x_i$. Stării fundamentale (de energie $-E_i/4$) îi corespunde starea $2p_o$ din semiconductorul masiv, iar primei stări excitate (de energie $-E_i/9$) îi corespund stările $3d_{\pm1}$. Funcţia de probă (10.2) se transformă (pentru $|x| < a/2$) în funcţia

$$F_{2p_o}(\mathbf{r}) = \frac{x - x_i}{4\sqrt{2\pi a_B^{*5}}}\exp(-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}{2a_B^*})$$

deoarece pentru $x_i/a = \pm a/2$ si $|x-x_i|/a \to 0$ avem

$$\cos\frac{\pi x}{a} = \cos(\pi\frac{x-x_i}{a} \pm \frac{\pi}{2}) = \mp\sin\pi\frac{x-x_i}{a} \to \mp\pi\frac{x-xi}{a}$$

Cazul 3.$a \ll a_B^*, |x_i| < a/2$.In acest caz funcţiile proprii pot fi reprezentate sub forma (10.1a) unde G nu depinde de x şi satisface ecuaţia Schrodinger bidimensională cu Hamiltonianul

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho_y^2} + \frac{\partial^2}{\partial\rho_z^2}\right) - \frac{q^2}{4\pi\varepsilon r}$$

unde $\rho_\pm = \rho_y \pm i\rho_z$, $\rho = |\boldsymbol{\rho}|$, $\boldsymbol{\rho}$ este componenta in plan a vectorului $\mathbf{r}-\mathbf{r}_i$ și în acest caz funcția de probă se reduce la o soluție exactă

$$F^{(2D)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \dfrac{2}{\sqrt{\pi\lambda^2 a}} \cos\dfrac{\pi x}{a} e^{-\rho/\lambda}; & |x| < \dfrac{a}{2} \\ 0; & |x| > \dfrac{a}{2} \end{cases}$$

unde parametrul variațional λ este egal cu raza Bohr a electronului bidimensional a_B^{2D} care este egală cu jumătate din raza Bohr din cazul tridimensional definită în (10.5). Pentru energia stării fundamentale $E=-E_i^{2D}=-4E_i$. Energia de legătură E_n^{2D} a stărilor localizate ale electronului excitat scade cu creșterea numărului cuantic principal n=1,2, " după relația

$$E_n^{(2D)} = \frac{E_i^{(2D)}}{(2n-1)^2} = \frac{E_i}{(n-\frac{1}{2})^2} \qquad (10.6)$$

Reamintim că în cazul tridimensional se găsește

$$E_n^{(3D)} = \frac{E_i}{n^2}; \qquad n = 1,2,..$$

Diferența esențială între stările locale 2D si 3D este că energia de legătură a stărilor 2D depinde de poziția în spațiu a centrului de impuritate. Pentru stările situate sub subbanda n=1 energia de legătură se definește ca diferența

$$E = E_1 - \langle F|H|F\rangle \qquad (10.7)$$

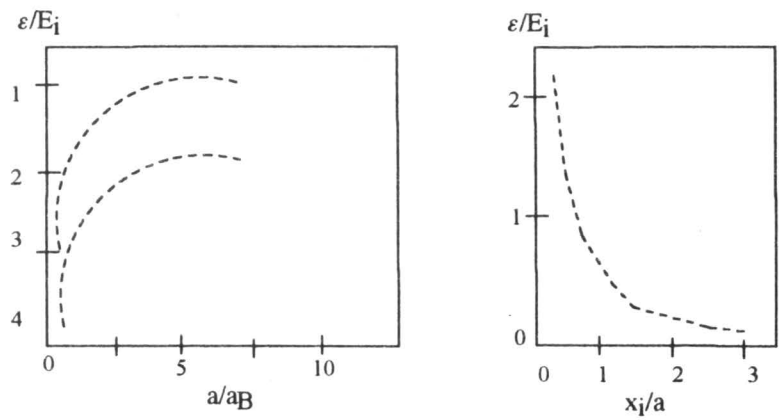


Fig. 2.19

unde E_1 este energia electronului la marginea inferioară a subbenzii, care pentru bariere infinit de înalte este dată de expresia $\hbar^2 k_1^2 / 2m$. In Fig.2.19 se reprezintă dependența energiei fundamentale a unui donor neutru : (a) de lărgimea văii cuantice pentru două poziiți ale centrului de impuritate: în centrul văii, $x_i=0$(cerculețe) și la interfața, $x_i=a/2$ (cruciulițe); (b) de poziția x_i a centrului de impuritate față de mijlocul văii pentru $a=a_B^*$. In cazul barirei de

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

potenţial de înalţime finită trebuie luată în considerare tunelarea electronului în afara văii astfel că funcţia $\chi(x)$ este diferită de zero atât în valea cuantică cât şi în barieră. Se obţine o derpendenţă de grosimea barierei a energiei de legătură puţin diferită de cea din cazul barierei de înălţime infinită [24]. Atunci când se calculează stările legate pe nivele acceptoare trebuie luată în considerare degenerarea benzii de valenţă [25].

2.11. *Impurităţi în superreţele*

Considerăm o superreţea construită din văi de GaAs de grosime a şi din bariere din AlGaAs de grosime b. Pentru $\kappa b >> 1$ structura poate fi considerată ca un sistem de văi cuantice izolate. Cu micşorarea lui b funcţiile de undă $\chi(x)$ în (10.1a) corespunzătoare văilor adiacente încep să se suprapună, energia E_1 a electronului la marginea inferioară a subbenzii cea mai de jos se deplasează în jos şi subbenzile devin minibenzi, caracterizate de o dispersie a energiei nu numai în k_y, k_z ci şi în k_x. Micşorarea lui b afectează valoarea energiei E_1 mai puternic decât valoarea energiei $E = \langle F|H|F\rangle$ a electronului legat de donor. Rezultă că energia de legătură a electronului pe donor, definită de relaţia (10.7) scade dacă creşte numărul de văi cuantice din structură. Am văzut în paragraful precedent că într-o singură vale cuantică,atunci când $a \to 0$ se anulează efectul văii cuantice asupra stării electronului legat şi $E \to E_i$(AlGaAs).Intr-o superreţea în care perioada $d=a+b \to 0$, probabilitatea ca un electron legat de donor să se găsească într-o vale sau într-o barieră depinde de valoarea relativă a lui a şi b şi energia de legătură se găseşte între E_i(GaAs) şi E_i(AlGaAs).Pentru a obţine soluţia exactă într-o structură periodică, funcţia de undă a electronului localizat pe donor poate fi dezvoltată în funcţii super-Bloch

$$F(\mathbf{r}) = \sum_{nk} G_{nk}\chi_{nk}(\mathbf{r}) \tag{11.1}$$

unde

$$\chi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}u_{nk}(x); \quad u_{nk}(x+d) = u_{nk}(x)$$

In superreţelele cu perioada mică în comparaţie cu raza Bohr a_B^* se poate neglija mixarea stărilor din diferite minibenzi în ecuaţia (11.1) şi folosi aproximaţia masei efective pentru calculul funcţiei

$$G(\rho, x) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}G_{\mathbf{k}} \tag{11.2}$$

In această aproximaţie funcţia $G(\boldsymbol{\rho},x)$ satisface ecuaţia Schrodinger

$$\left(-\sum_j \frac{\hbar^2}{2m_{jj}}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} - \frac{q^2}{4\pi\varepsilon|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}\right)G = EG \tag{11.3}$$

cu masele efective ale electronului în superreţea calculate în modelul Kronig-Penney.Dacă m şi m_1, masele efective ale electronului din valea cuantică şi respectiv, barieră, sunt izotrope atunci masele transversale m_{yy} şi m_{zz} vor coincide.In acest caz energia de legătură a electronului pe donor corespunzătoare stării fundamentale se găseşte utilizând metoda variaţională cu o funcţie de probă de forma cea mai simplă

$$G(\rho, x) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_1 a_2^2}}\exp\left[-\left(\frac{\rho^2}{a_2^2} + \frac{x^2}{a_1^2}\right)^{1/2}\right] \tag{11.4}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde a_1 si a_2 sunt parametri variaţionali. Aceşti parametri se determină din condiţia de minim a funcţionalei

$$< G(H)G >= E_{it}[\frac{1}{3}(\frac{a_{Bt}}{a_2})^2(2+\frac{\gamma}{1-\beta^2}-2\frac{a_{Bt}}{a_2}\frac{\arcsin\beta}{\beta}] \tag{11.5}$$

unde

$$\beta^2=\frac{a_2^2-a_1^2}{a_2^2},\gamma=\frac{m_t}{m_l};m_t=m_{yy}=m_{zz};m_l=m_{xx}\ ;E_{it}=\frac{m_t q^4}{32\pi^2\hbar^2\varepsilon^2};a_{Bt}=\frac{4\pi\hbar^2\varepsilon}{m_t q^2}$$

Efectuând minimul acestei funcţionale obţinem următoarele ecuaţii pentru a_2 şi β în cazul $\gamma<1$

$$\begin{aligned} a_2 &= a_{Bt}\frac{1}{3}(2+\frac{\gamma}{1-\beta^2})\frac{\beta}{\arcsin\beta} \\ \gamma &= 2(1-\beta^2)^{3/2}\frac{\sqrt{1-\beta^2}\arcsin\beta}{\beta\sqrt{1-\beta^2}-\arcsin\beta} \end{aligned} \tag{11.6}$$

In cazul $\gamma>1$ se substituie în aceste expesii $1-\beta^2$ cu $1+\beta^2$ şi $\arcsin\beta$ cu $\mathrm{arcsinh}\beta$. Energia de legătură este dată de expresia

$$E=-<G|H|G>=E_{it}\frac{a_{Bt}}{a_2}\frac{\arcsin\beta}{\beta} \tag{11.7}$$

Dacă masa efectivă este slab anizotropă parametrul $(1-\gamma)$ este mic şi în primă aproximaţie relaţiile (11.6), (11.7) devin

$$\beta^2=\frac{5}{7}(1-\gamma);a_2=a_{Bt}[1-\frac{3}{14}(1-\gamma)];E=\frac{E_i}{m}(\frac{2}{3}m_t+\frac{1}{3}m_l) \tag{11.8}$$

In cazul unei superreţele cu perioada mică în care este satisfacută inegalitatea

$$d << (mU_0/\hbar^2)^{-1/2}$$

Expresiile lui m_l şi m_t se obţin dezvoltând în serie după puterile lui $kd, k_A a, k_B b$ funcţiile $\cos k_A a$, $\cosh\kappa_B b$, $\sin k_A a$, $\sinh\kappa_B b$ în expresia (7.4). Pentru condiţiile de frontieră

$$\begin{aligned} F|_{x=a/2} &= F_1|_{a/2} \\ \frac{1}{m}\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_{x=a/2} &= \frac{1}{m_l}\left(\frac{\partial F_l}{\partial x}\right)_{x=a/2} \end{aligned} \tag{11.9}$$

se obţine

$$m_l=\frac{ma+m_l b}{a+b};m_t=\frac{1}{a+b}(\frac{a}{m}+\frac{b}{m_l})$$

$$\gamma=\left[1+\frac{ab}{mm_l}(\frac{m-m_l}{a+b})^2\right]^{-1}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Masa efectivă a electronului în $Al_xGa_{1-x}As$ variază cu compoziţia după expresia

$$m_l(x)=(0,067+0,83x)m_o$$

Se observă că în superreţeaua $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ cu $x<0,4$ anizotropia masei efective nu depăşeşte 4%. Substituind expresiile de mai sus ale m_l şi m_t în (11.8) se obţine pentru energia de legătură a electronului pe donor în supereţea expresia

$$E \cong \frac{q^4}{32\pi^2\varepsilon^2\hbar^2}\frac{mm_l}{am_l+bm} \cong \frac{q^4}{32\pi^2\varepsilon^2\hbar^2}\frac{am+bm_l}{a+b}$$

In aproximaţia utilizată mai sus energia de legătură a electronului nu depinde de poziţia donorului în SR. Această dependenţă apare atunci când calculăm energia potenţială

$$U_p = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon}\int F^2(\mathbf{r})\frac{d\mathbf{r}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}$$

în care pentru F(**r**) nu luăm numai funcţia $G(\rho,x)$ ci funcţia $G(\rho,x)u_o(x)$ unde $u_o(x)$ este amplitudinea periodică a funcăiei super-Bloch la k=0 iar $G(\rho,x)$ este funcţia de probă care poate fi aleasă de asemenea de forma (11.4). In aceast situatie la energia potentiala

$$U_{po} = -2E_{it}\frac{a_{Bt}}{a_2}\frac{\arcsin\beta}{\beta}$$

din expresia (11.5) se adaugă termenul

$$\Delta U_p = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon}\int G^2(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)[u_o^2(x+x_i)-1]\frac{d\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|}$$

Funcţia periodică $u_o(x)$ se dezvoltă în serie Fourier

$$u_o(x) = \sum C_l e^{ib_l x}$$

unde $b_l=2\pi l/d$ ($l=0,\pm1,$"). Utilizând relaţia integrală

$$\int e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}}\frac{d\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|} = \frac{4\pi}{q^2}$$

obţinem pentru SR cu perioada mică,$d<a_B$

$$\Delta U_p = -\frac{q^2}{\pi\varepsilon a_1 a_2^2}\sum_{l=l'}\frac{C_l^* C_{l'}}{(b_l-b_{l'})^2}e^{i(b_{l'}-b_l)x_i} = -\frac{q^2}{\pi\varepsilon a_1 a_2^2}\lim_{\eta\to+0}\frac{d}{d\eta}\int_0^\infty[u_o^2(x+x_i)-1]e^{-\eta x}dx] =$$

$$= -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon a_1 a_2^2}[\frac{d^2}{3} - 2\int_0^d u_o^2(x+x_i)(\frac{x^2}{d}-x)dx]$$

această expresie poate fi adusă la forma

$$\Delta U_p = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon a_1 a_2^2}(\frac{d^2}{6} - I_1^2 + I_2^2 - 2x_i^2)$$

$$I_1^2 = \frac{4}{d}\int_o^{d/2} u_o^2(x+\frac{d}{2})x^2dx; I_2^2 = 4\int_0^{x_i} u_o^2(x)(x_i-x)dx$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Functia super-Bloch la marginea inferioară a minibenzii cea mai de jos poate fi scrisă sub forma

$$u_o(x) = C_a \cos k_A(x - x_a) \qquad \text{în văi} \qquad (11.12)$$

$$u_o(x) = C_b \cosh \kappa_B (x - x_b) \qquad \text{în bariere}$$

unde

$$k_A = (\frac{2m}{\hbar^2} E_o)^{1/2}; \qquad \kappa_B = [\frac{2m_1}{\hbar^2}(U_o - E_o)]^{1/2}$$

unde E_o este energia la marginea inferioară a minibenzii cea mai de jos si $x_{a,b}$ este poziţia corespunzătoare mijlocului văii sau barierei. Folosind condiţiile de frontieră (11.9) şi condiţia de normare

$$\int_d u_o^2(x)dx = d$$

se determină coeficienţii C_a si C_b din relaţiile

$$C_a^2 = 2(a+b)[a(1+\frac{\sin k_A a}{k_A a}) + b(1+\frac{\sinh \kappa_B b}{\kappa_B b})\frac{1+\cos k_A a}{1+\cosh \kappa_B b}]^{-1}$$

$$C_b^2 = \frac{1+\cos k_A a}{1+\cosh \kappa_B b} C_a^2$$

Având în vedere condiţia de normare (11.13) se obţine

$$I_1^2 = \frac{1}{4d}(C_a^2\{\frac{d^3 - b^3}{3} + \frac{1}{k_A^3}[-2k_A b \cos k_A a + 2k_A d + (k_A^2 b^2 - 2)\sin k_A a]\} +$$

$$C_b^2\{\frac{1}{3}b^3 + \frac{1}{\kappa_B^3}[(\kappa_B^2 b^2 + 2)\sinh \kappa_B b - 2\kappa_B b \cosh \kappa_B b]\})$$

$$I_2^2 = C_a^2(x_i^2 + \frac{\sin^2 k_A x_i}{k_A^2}), |x_i| \le a/2$$

$$I_2^2 = C_a^2[a(x_i - \frac{a}{4})^2 + \frac{1}{k_A^2}(1 - \cos k_A a - k_A a \sin k_A a) + \frac{x_i}{k_A}\sin k_A a] +$$

$$C_b^2[(x_i - \frac{a}{2})^2 + \frac{1}{\kappa_B^2}(\cosh \kappa_B x_i - \cosh \kappa_B a) - \frac{1}{\kappa_B}(x_i - \frac{a}{2})\sinh \kappa_B a], a/2 \le |x_i| \le d/2$$

In Fig.2.20 se reprezintă dependenţa energiei de legătură a electronului de poziţia centrului de impuritate în SR $GaAs/Al_{0,35}Ga_{0,65}As$ cu d≤5 nm (a=b). Cu săgeţi este indicată energia de legătură atunci când se neglijează Δu_p. Se observă din figură că atunci când centrul donor este aşezat în mijlocul văii cuantice, E este mai mare decât atunci când se neglijează ΔU_p iar când centrul este aşezat în mijlocul barierei, E este mai mic decât în cazul când se neglijează ΔU_p.Notăm că în partea de jos este reprezentată energia potenţială a superreţelei (diagrama de benzi de energie).

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

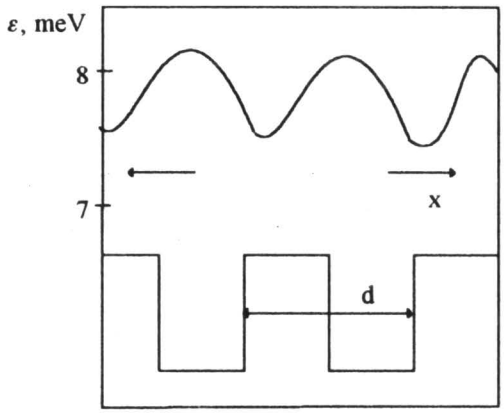


Fig. 2.20

2.12. *Niveluri de energie localizate pe defecte ale superreţelei*

Distorsiunile periodicităţii superreţelei determină următoarele tipuri de defecte reprezentate în Fig.2.21 a,b,c: (a) vale sau văi de dimensiuni diferite de dimensiunea standard din superreţea; (b) deplasarea unei interfeţe; (c) deplasarea simetrică a două interfeţe adiacente. Aceste defecte pot fi introduse intenţionat sau pot apare accidental în timpul preparării. Pentru a calcula energia de legătură a electronului pe un defect considerăm că acest defect constă dintr-un număr finit de straturi care sunt situate în intervalul $x_1<x<x_2$.

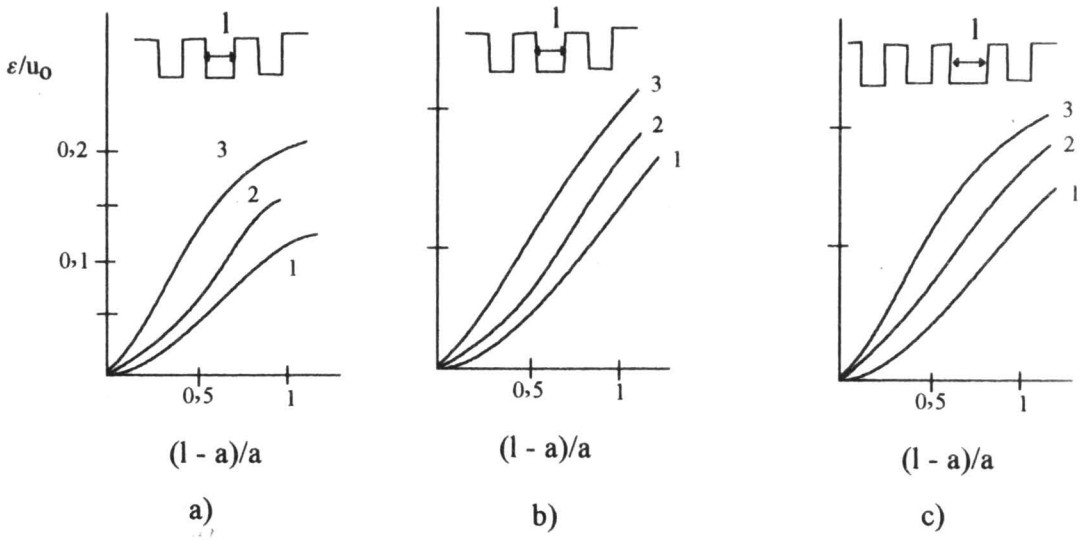


Fig. 2.21

Regiunea din afara acestui interval conţine straturi alternative de văi şi bariere de grosime a şi, respectiv, b. Ecuaţia din care se determină energia E a electronului se poate găsi din egalarea în punctele x_1 şi x_2 a soluţiei F(**r**) pe defect cu soluţia din regiunile ordonate $x<x_1$ şi $x>x_2$. Această din urmă soluţie coincide cu soluţia ecuaţiei Schrodinger pentru o SR perfectă, care satisface condiţia

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$F^{\pm}(x+a+b)=e^{\pm\beta(a+b)}F^{\pm}(x) \tag{12.1}$$

unde Re(β)>0.Relaţia de dispersie $b(E,k_t)$ este dată de ecuaţia

$$\cosh\beta d = P(E,k_y^2,k_z^2) \tag{12.1a}$$

care diferă de ec.(7.4) prin aceea că în locul lui $\cos k_x d$ apare $\cosh\beta d$, deoarece stările localizate se află în zona de stări interzise unde funcţia $P(E,k_y^2,k_z^2)$ ia valori în afara intervalului [-1,+1]. In subbanda interzisă situată deasupra primei minibenzi (cea mai de jos minibandă) unde P<-1, β conţine un termen imaginar iπ/d definit în 2πiN/d unde N este un număr întreg. In cele ce urmează considerăm stările situate sub marginea inferioară a minibenzii cea mai de jos în care caz P>1 şi stările lui $\beta(E,k_t)$ sunt reale. Introducem matricile de transfer M_i adimensionale care leagă perechile de valori ale lui F şi $F^{**}=(m/m_i)k^{-1}(dF/dx)$ la frontierele din stânga şi din dreapta stratului i. Pentru un strat de tip vale şi barieră de grosime l, aceste matrici pot fi scrise

$$M_v(l)=\begin{bmatrix}\cos kl & \sin kl\\ -\sin kl & \cos kl\end{bmatrix};\qquad M_b(l)=\begin{bmatrix}\cosh\kappa l & \eta^{-1}\sinh\kappa l\\ \eta\sinh\kappa l & \cosh\kappa l\end{bmatrix} \tag{12.2}$$

$$\eta=\frac{m}{m_i}\frac{\kappa}{k}$$

unde am omis indicele a de la k şi indicele b de la κ. Dacă se ia în considerare continuiţatea lui F şi F^{**} la frontiere se găseşte următoarea relaţie între valorile funcţiilor (12.1) la $x = x_1$ şi $x = x_2$

$$\begin{bmatrix}F^{+}(x_1)\\ F^{**+}(x_1)\end{bmatrix}=M\begin{bmatrix}F^{-}(x_2)\\ F^{**-}(x_2)\end{bmatrix} \tag{12.3}$$

unde

$$M=\prod_{i=1}^{N}M_i(l_i) \tag{12.4}$$

este matricea de transfer în întreaga regiune de defecte. Din (12.2) se obţine că $\mathrm{Det}\{M_i(l_i)\}=1$ şi deoarece

$$\mathrm{Det}\{M\}=\prod_{i=1}^{N}\mathrm{Det}\{M_i(l_i)\}$$

se obţine ca matricea (12.4) satisface condiţia

$$\mathrm{Det}\{M\}=M_{11}M_{22}-M_{12}M_{21}=1 \tag{12.5}$$

Rezolvând (12.3) se obţine ecuaţia pentru energia stărilor localizate ale electronului

$$w^{+}(x_1)=\frac{M_{21}+M_{22}w^{-}(x_2)}{M_{11}+M_{12}w^{-}(x_2)} \tag{12.6}$$

unde

$$w^{\pm}=F^{**\pm}/F^{\pm}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

La interfețele vb și bv ale unei superrețele ordonate avem

$$w_{vb}^{\pm} = -w_{bv}^{\pm} = \frac{\cos ka - e^{\pm\beta(a+b)}\cosh \kappa b}{\sin ka + \eta^{-1}e^{\pm\beta(a+b)}\sinh \kappa b} = \frac{e^{\mp\beta(a+b)} - \cos ka \cosh \kappa b - \eta \sin ka \sinh \kappa b}{\sin ka \cosh \kappa b + \eta^{-1}\cos ka \sinh \kappa b} \tag{12.7}$$

Prima egalitate rezultă din simetria într-o SR perfectă când se înlocuiește x cu -x iar ultima egalitate este o altă formă de a scrie relația de dispersie (12.1a). In locul lui $w^{+}(x_1)$ în (12.6) se scrie w_{vb}^{+} sau w_{bv}^{+} în funcție dacă stratul care vine în contact cu regiunea defectului este de tip b sau de tip v.In mod similar $w^{-}(x_2)$ se înlocuiește cu w_{vb}^{-} sau w_{bv}^{-} dacă stratul cu care vine în contact defectul este de tip v sau de tip b. Să aplicăm acum ecuațiile generale (12.4)-(12.7) pentru a determina stările localizate ale electronului pe defecte de tipul a,b,c reprezentate în Fig.2.21. Ecuația de dispersie $E(k_t)$, (12.6) se simplifică atunci când se iau în considerare proprietățile de simetrie sau alte proprietăți ale defectului. Considerăm întâi defectul reprezentat în Fig. 2.21a. Pentru stările pare facem substituțiile

$$w^{+}(x_1)=w_{vb}^{+};\ w^{-}(x_2)=w_{bv}^{-};\ w_{bv}^{-}=-w_{vb}^{+}$$

$$M_{11}=M_{22}=\cos kl;\ M_{12}=-M_{21}=\sin kl$$

Ec.(12.6) devine în acest caz

$$-\tanh(kl/2)+w_{vb}^{+}=0 \tag{12.8}$$

din care se determină stările localizate ale electronului în acest caz.Ecuația pentru stările impare se obține din (12.8) substituind tan(kl/2) cu -cotan(kl/2). Cu l am notat lărgimea văii defect. Pentru defecte de tipul celui reprezentat în Fig. 2.21b în care are loc o deplasare a interfeței matricea

$$M=M_b(d-l)=M_v(l-a)$$

poate fi scrisă sub forma

$$M=M_b(b)M_b^{-1}(l-a)M_v(l-a)$$

și notând

$$M'=M_b^{-1}(l-a)M_v(l-a)$$

ec.(12.6) se poate scrie

$$w_{vb}^{+} = \frac{M'_{21} + M'_{22}w_{vb}^{-}}{M'_{11} + M'_{12}w_{vb}^{-}} \tag{12.9}$$

Pentru defecte de tipul celui prezentat în Fig.2.21c, deplasarea simetrică a interfețelor, se obține

$$w_{vb}^{+} = \frac{1}{2M_{12}}[M_{11} + M_{22} + \sqrt{(M_{11} + M_{22})^2 - 4M_{12}M_{21}}] = (M_{11} \pm 1)M_{12} \tag{12.10}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Cu l am notat lărgimea văii defect și

$$M = M_b^{-1}(h)M_v(a+2h)M_b^{-1}(h); \qquad h = (l-a)/2$$

Expresia (11.10) a fost dedusă ținând cont de identitatea (12.5) și egalitatea componentelor diagonale ale matricii M.Semnul + și - coresounde stărilor impare și, respectiv, pare. In Fig.2.21 a,b,c se reprezintă energia de legătură $E'=E_o-E$ pentru stările localizate în cele trei cazuri , pentru $k_t=0$. Calculul s-a efectuat pentru o superreţea $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ pentru x=0,35 ceea ce corespunde înălțimii barierei $U_o=0,25$ eV, $m_l=1,43m_o$, $m=0,067m_o$, pentru a=b=1,5 nm(curba 1),2 nm(curba 2),3 nm(curba 3)[25].Se observă că în toate cazurile $E_o-E\rightarrow 0$ pentru $l\rightarrow a$.

2.13. *Spectrul de energie a electronilor în valea cuantică și în superreţea în prezența unui câmp electric.*

In câmp electric constant, $F=F_x$, ecuaţia lui Schrodinger care descrie mișcarea electronului este de forma

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+qFx)\Psi + E\Psi$$

In acest paragraf notăm funcţia anvelopă cu Ψ pentru a nu se confunda cu câmpul electric notat cu F. Soluţia acestei ecuaţii este de forma

$$\Psi(\gamma)=C_1A_i(\gamma)+C_2B_i(\gamma) \qquad (13.1)$$

unde $A_i(\gamma)$ si $B_i(\gamma)$ sunt funcţiile Airy și

$$\gamma = -(x+\frac{E}{qF})(\frac{2mqF}{\hbar^2})^{1/3} = -\beta^{2/3}(x+x_o)$$

$$x_o = \frac{E}{qF}; \qquad \beta = (\frac{2mqF}{\hbar^2})^{1/2}$$

Pentru o vale cuantică de grosime a, infinit de adâncă,ecuaţia din care se determină energia E se găsește din condiţia ca funcţia de undă (13.1) să se anuleze la $x=\pm a/2$,ceea ce corespunde la $\gamma=\gamma_{1,2}=\beta^{2/3}(x\pm a/2)$. Ecuaţia seculară corespunzătoare poate fi scrisă sub forma

$$A_i(\gamma_1)B_i(\gamma_2)-A_i(\gamma_2)B_i(\gamma_1)=0 \qquad (13.2)$$

Expresie analitică (explicită) pentru energie se obţine în limita câmpului electric slab sau intens, unde se pot utiliza expresiile asimptotice ale funcţiilor Airy.Pentru $|\gamma| << 1$

$$\begin{aligned} A_i(\gamma) &= D_1f(\gamma) - D_2g(\gamma) \\ B_i(\gamma) &= \sqrt{3}[D_1f(\gamma) + D_2g(\gamma)] \end{aligned} \qquad (13.3)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde

$$f(\gamma) = 1 + \frac{\gamma^3}{3!} + \frac{4}{6!}\gamma^6 + \ldots$$

$$g(\gamma) = \gamma + \frac{2}{4!}\gamma^4 + \frac{2.5}{7!}\gamma^7$$

$$D_1 = 3^{-2/3}\Gamma(2/3) \approx 0{,}355; \qquad D_2 = 3^{-1/3}\Gamma(1/3) \approx 0{,}259$$

Pentru $|\gamma| >> 1$

$$A_i(|\gamma|) = \frac{1}{2}\pi^{-1/2}|\gamma|^{-1/4}e^{-\xi}(1 - \frac{5}{72}\xi^{-1} + \ldots)$$

$$B_i(\gamma) = \pi^{-1/2}|\gamma|^{-1/4}e^{\xi}(1 + \frac{5}{72}\xi^{-1} + \ldots)$$

$$A_i(-|\gamma|) = \pi^{-1/2}|\gamma|^{-1/4}[\sin(\xi + \frac{\pi}{4}) - \frac{5}{72}\xi^{-1}\cos(\xi + \frac{\pi}{4}) + \ldots] \qquad (13.4)$$

$$B_i(-|\gamma|) = \pi^{-1/2}|\gamma|^{-1/4}[\cos(\xi + \frac{\pi}{4}) + \frac{5}{72}\xi^{-1}\sin(\xi + \frac{\pi}{4}) + \ldots]$$

$$\xi = \frac{2}{3}|\gamma|^{3/2}$$

In câmp electric slab, adică pentru $-\gamma >> 1$ se obţine din (13.2-13.4)

$$\sin(\xi_2 - \xi_1) = \frac{5}{72}(\xi_1^{-1} - \xi_2^{-1})\cos(\xi_2 - \xi_1) \qquad (13.5)$$

unde

$$\xi_{1,2} = \frac{2}{3}|\gamma_{1,2}|^{3/2} = \frac{2}{3}\beta(x \pm \frac{a}{2})^{3/2}$$

Deoarece în această aproximaţie $\xi_{1,2} >> 1$ soluţia ec.(13.5) poate fi luată de forma $\xi_2^n - \xi_1^n = \pi n + \varphi_n$. Dezvoltând $\xi_1^{-1} - \xi_2^{-1}$ în serie după puterile lui $a/2x_o$ se poate găsi ϕ_n şi obţine astfel valoarea lui E_n

$$E_n = E_n^o[1 + \frac{1}{48}(\frac{qFa}{E_n^o})^2(1 - \frac{15}{(\pi n)^2})] \qquad (13.6)$$

$E_n^o = \hbar^2\pi^2 n^2/(2ma^2)$ este energia nivelului n în absenţa câmpului electric. Aşa cum reiese din această expresie, în câmp electric slab primul nivel (n=1) este deplasat în jos iar celelalte nivele sunt deplasate în sus. Dacă se compară expresia (13.6) cu soluţia exactă a ec. (13.2) se obţine că pentru $(qF/E_1^o) << 1$, soluţia ec.(13.6) determină deplasarea indusă de câmp a unui nivel cu o eroare de cel mult 1%.In câmp electric intens, adică pentru $qFa >> E_1^o$, energia unei stări măsurată de la marginea inferioară a văii cuantice se determină din condiţia

$$A_i(-\beta^{2/3}x_o) = 0 \qquad (13.7)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

și poate fi scrisă sub forma

$$E_n = a_n \frac{(qF\hbar)^{2/3}}{(2m)^{1/3}} \tag{13.8}$$

unde $-a_n$ sunt rădăcinile ecuației $A_i(\gamma)=0$. Valorile numerice ale primelor rădăcini sunt $a_1=2,338$; $a_2=4,088$; $a_3=5,52$; $a_4=6,787$; $a_5=7.944$. Dacă se compară cu soluția exactă a ec.(13.2) pentru $qFa/E_1^{\circ}>10$, se obține că (13.8) dă o valoare cu o eroare sub 1%. Funcția variațională utilizată în mod frecvent în cazul unei bariere triunghiulare

$$\Psi = 2\alpha^{3/2}\gamma e^{-\alpha\gamma} \qquad \alpha = (\frac{3}{2}\frac{qFm}{\hbar})^{1/3}$$

dă pentru energia primului nivel o expresie care coincide cu (13.8) pentru $a_1=2,47$ care diferă cu 6% de valoarea exactă $a_1=2,34$. Notăm că aproximația cuasiclasică da valorile energiei care coincid cu (13.8) în limita unei erori de 1%. S-a arătat că funcția variațională

$$\Psi = Ce^{-\alpha x}\sin\frac{\pi x}{a}$$

dă pentru o vale cuantică cu pereți infiniți la x=0 și x=a , în tot domeniul de variație a câmpului electric o energie pentru primul nivel care diferă cu cel mult 8% de valoarea exactă dată de ec.(13.2). Prezentăm în continuare spectrul de energie a electronilor într-o superrețea în prezența câmpului electric. La câmp electric slab, când $qFd<<\Delta E$ unde d este perioada superrețelei și ΔE este lărgimea minibenzii, spectrul de energie a electronilor într-o superrețea se poate găsi utilizând metoda masei efective. In reprezentarea k se poate scrie

$$qF\hat{x} = iqF\frac{\partial}{\partial k}$$

Soluția ecuației

$$[ikF\frac{\partial}{\partial k} + E(k) - E]\Psi = 0$$

este de forma

$$\Psi(k) = C\exp\{\frac{i}{qF}\int_{-\pi/d}^{k}[E(k') - E]dk'\}$$

Din condiția de periodicitate $\Psi(k+2\pi/d) = \Psi(k)$ rezultă

$$\frac{i}{qF}\int_{-\pi/d}^{\pi/d}[E(k') - E_n]dk' = -2\pi ni$$

Având în vedere că $E(k)=E_o+\sum_N C_N \cos kNd$ este o funcție periodică , se obține

$$E_n=E_o+qFnd \tag{13.9}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Prin urmare, câmpul electric despică minibanda într-o serie de nivele echidistante, scara Stark, cu distanţa $\delta E=qFd$ între ele. Acest efect se numeşte cuantificarea Wannier-Stark. In celălalt caz limita $qFd>>\Delta E$, funcţiile de undă ale electronilor sunt localizate în văi cuantice separate. Poziţia unui nivel în fiecare vale cuantică este dată practic de o expresie similară cu (13.2), distanţa dintre două nivele din văile adiacente fiind qFd, la fel ca în cazul scării Stark. In cazurile intermediare,c ând $qFd\sim\Delta E$, funcţia de undă a electronului dintr-o vale cuantică penetrează parţial în valea adiacentă. Calculul se efectuează numeric.In superreţelele tensionate câmpul mediu este zero astfel că potenţialul V(x) rămâne periodic.In acest caz spectrul de energie a electronilor se calculează luând funcţiile de undă în văi şi bariere de forma (13.1) şi impunând condiţia de periodicitate.

2.14. *Superreţele optice*

Superreţeaua optică este supereţeaua în care straturile adiacente au constante dielectrice diferite.In plus se presupune că straturile sunt suficient de groase astfel încât se neglijează efectele de confinare cuantică a electronilor şi golurilor.Insă se ia în considerare confinarea excitonului ca întreg într-un strat.Intr-o asemenea structură cu constanta dielectrică periodică undele de lumină se propagă sub forma de unde Bloch. La condiţiile de frontieră Maxwell care apar la propagarea luminii printr-un mediu cu constante dielectrice diferite se adaugă contribuţia excitonică la polarizarea mediului (aşnumitele condiţii adiţionale de frontieră). In superreţeaua cu perioadă mică, adică nu superreţeaua optică, propagarea luminii areloc aproximativ ca într-un mediu omogen,ca în cristalul tridimensional. In acest caz fiecare exciton activ optic aduce o contribuţie polară la tensorul permitivităţii dielectrice efective a cărei valoare este determinată de frecvenţa de rezonanţă, forţa oscilatorului şi relaxarea excitonului în hetrojoncţiune. Aceşti trei parametri pot fi determinaţi experimental din spectrul de reflexie sau de transmisie. Revenind la superreţeaua optică ,pentru a descrie fenomenele optice în cazul electrodinamicii macroscopice scriem următoarele relaţii care leagă între ele inducţia magnetică **B** şi deplasarea **D** cu intensitatea câmpului magnetic **H** şi respectiv intensitatea câmpului electric **F**:

$$\mathbf{B}=\mu_o\mathbf{H};\quad D_\alpha(\omega,\boldsymbol{\kappa})=\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega,\boldsymbol{\kappa})F_\beta(\omega,\boldsymbol{\kappa})$$

unde μ_o este permeabilitatea vidului , $\varepsilon_{\alpha\beta}$ este tensorul constantei dielectrice,ω este frecvenţa şi $\boldsymbol{\kappa}$ este vectorul de undă al radiaţiei. Neglijăm în cele ce urmează dependenţa lui ε de $\boldsymbol{\kappa}$ adică dispersia spaţială (sau nelocalitatea). Considerăm o superreţea optică ce conţine o succesiune de două tipuri de straturi cu constantele dielectrice izotrope $\varepsilon^a_{\alpha\beta}=\varepsilon^a\delta_{\alpha\beta}$ (stratul de grosime a) şi $\varepsilon^b_{\alpha\beta}=\varepsilon^b\delta_{\alpha\beta}$ (stratul de grosime b). Vom analiza răspunsul dielectric liniar în această structură. Având în vedere natura periodică a superreţelei scriem soluţiile ecuaţiilor lui Maxwell sub forma de funcţii Bloch

$$F(\mathbf{r})=F(x)e^{i\mathbf{Q}.\mathbf{r}};\quad F(x+d)=F(x);\ d=a+b.$$

Intr-o structură cu straturi izotrope există două tipuri de soluţii Bloch şi anume unde TE sau polarizate s care au $\mathbf{F}\perp\mathbf{Q}$, x iar **H** cuprins în planul (**Q**,x) şi unda TM sau polarizată p cu $\mathbf{H}\perp\mathbf{Q}$, x. Condiţiile de frontieră se scriu

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$F_{\perp}^{a} = F_{\perp}^{b}; \qquad D_{x}^{a} = D_{x}^{b}; \qquad \varepsilon^{a} F_{x}^{a} = \varepsilon^{b} F_{x}^{b}$$

Cu aceste condiţii de frontieră şi cu condiţia de periodicitate de mai sus se obţine o relaţie de dispersie similară cu cea pentru electronii Bloch în SR

$$\cos[Q_x(a+b)] = \cos(k_a a)\cos(k_b b) - \frac{1}{2}(\gamma + \frac{1}{\gamma})\sin(k_a a)\sin(k_b b)$$

unde $\gamma_s = k_b/k_a$ pentru undele TE şi $\gamma_p = \varepsilon^a k_b/\varepsilon^b k_a$ pentru undele TM. Celelalte notaţii au următoarea semnificaţie

$$k_o = \frac{\omega}{c}, \qquad Q_{\perp}^2 = Q_y^2 + Q_z^2; \qquad k_a = (\varepsilon^a k_o^2 - Q_{\perp}^2)^{1/2}; \quad k_b = (\varepsilon^b k_o^2 - Q_{\perp}^2)^{1/2}$$

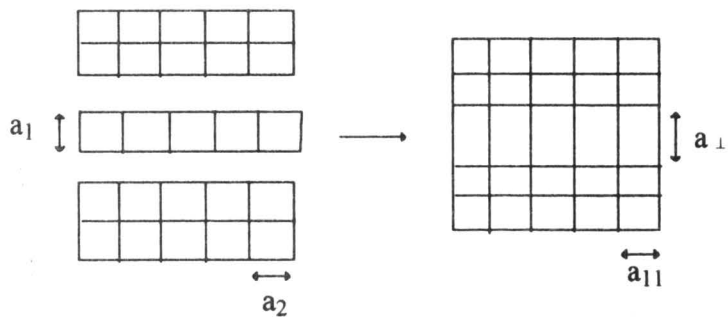


Fig. 2.22

Pentru a analiza spectrul în vecinătatea extremurilor rescriem (17.1) sub forma

$$1\text{-}\cos Q_x d = \frac{1}{2}\sin k_a a \sin k_b b(\tan\varphi_a + \gamma\tan\varphi_b)(\frac{1}{\gamma}\cot an\varphi_a + \cot an\varphi_b) \qquad (17.2)$$

sau

$$1+\cos Q_x d = \frac{1}{2}\sin k_a a \sin k_b b(\tan\varphi_a - \gamma\tan\varphi_b)(-\frac{1}{\gamma}\cot an\varphi_a + \tan\varphi_b) \qquad (17.3)$$

unde $\phi_a = k_a a/2; \phi_b = k_b b/2$. Frecvenţele pentru undele de lumină normale pentru $Q_x=0$ si $Q_x=\pm\pi/d$ se găsesc din condiţia ca să se anuleze una din parantezele din drepta relaţiilor (17.2) şi,respectiv (17.3). In aproximaţia undelor lungi, cand $|\varphi_\alpha|, |\varphi_\beta| << 1$, câmpurile electrice F_y, F_z şi deplasarea D_x se modifică foarte puţin pe o lungime de ordinul perioadei d.In acest caz superreţeaua optică poate fi considerată ca un mediu omogen cu o constanta dielectrică efectivă

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_{\alpha\alpha}\delta_{\alpha\beta}; \quad \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} \equiv \varepsilon_t = \eta\varepsilon^a + (1-\eta)\varepsilon^b; \qquad \frac{1}{\varepsilon_{xx}} \equiv \frac{1}{\varepsilon_l} = \eta\frac{1}{\varepsilon_a} + (1-\eta)\frac{1}{\varepsilon^b}$$

unde $\eta = a/(a+b)$. Rezultă că în această situaţie $\varepsilon_t > \varepsilon_l$ pentru $\varepsilon^a, \varepsilon^b$ mărimi pozitive şi reale. Atunci când structura este formată din materiale anizotrope, tensorul constantei dielectrice efective este definit în aproximaţia lungimilor de undă lungi prin relaţiile

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$\varepsilon_{\alpha\beta} - \frac{\varepsilon_{\alpha 1}\varepsilon_{\beta 1}}{\varepsilon_{11}} = \eta(\varepsilon^{a}_{\alpha\beta} - \frac{\varepsilon^{a}_{\alpha 1}\varepsilon^{a}_{\beta 1}}{\varepsilon^{a}_{11}}) + (1-\eta)(\varepsilon^{b}_{\alpha\beta} - \frac{\varepsilon^{b}_{\alpha 1}\varepsilon^{b}_{\beta 1}}{\varepsilon^{b}_{11}})$$

$$\frac{\varepsilon_{\alpha 1}}{\varepsilon_{11}} = \frac{\varepsilon_{1\alpha}}{\varepsilon_{11}} = \eta\frac{\varepsilon^{a}_{\alpha 1}}{\varepsilon^{a}_{11}} + (1-\eta)\frac{\varepsilon^{b}_{\alpha 1}}{\varepsilon^{b}_{11}}; \qquad \frac{1}{\varepsilon_{11}} = \eta\frac{1}{\varepsilon^{a}_{11}} + (1-\eta)\frac{1}{\varepsilon^{b}_{11}}$$

unde axa 1||x.

2.15. *Văi cuantice și superrețele supuse la tensiuni mecanice*

S-a observat că diferența da dintre constantele de rețea ale celor două materiale care alcătuiesc o superrețea determină o deformare elastică a materialelor. De exemplu, dacă materialul stratului care constituie valea de potențial are constanta rețelei mai mare decât materiaul stratului care constituie bariera de potențial atunci rețeaua stratului văii se comprimă în planul stratului (al interfeței) și în același timp constanta rețelei pe direcție perpendiculară se alungește (pentru a se menține același volum al celulei elementare). In stratul barierei efectul este invers: o alungire în planul barierei (al stratului) și o compresie în direcție perpendiculară. Dacă structura conține o singură vale de potențial (stratul subțire) cuprinsă între două bariere (straturi groase) atunci efectul este mare asupra văii de potențial și straturile groase sunt mai puțin tensionate. Un asemenea exemplu este reprezentat în Fig. 2.22 unde cu a_1 s-a notat constanta rețelei stratului văii iar cu a_2 constanta rețelei straturilor de barieră ($a_2<a_1$). In structura realizată (partea dreaptă), $a_{||}(=a_2)<a_{\perp}(=a_1)$. De exemplu în superrețeaua GaSb/AlSb constanta rețelei GaSb este a_2=0,60959 nm iar a AlSb, a_1=0,61355 nm; diferența relativă da/a=0,65%. Această diferență determină apariția unor tensiuni mecanice în straturile adiacente care au ca efect micșorarea benzii interzise a GaSb și o inversiune a subbenzilor golurilor grele și ușoare între ele [26]. In AlSb tensiunile care apar în planul stratului sunt de compresie iar in GaSb sunt de alungire. De fapt aceste tensiuni,atat cele de alungire cât și cele de compresie, sunt biaxiale, orientate în direcțiile y și z din planul stratului. Fenomenul poate fi analizat ca o sumă dintre o dilatare hidrostatică și o compresie uniaxială în direcția x pentru straturile de GaSb sau ca o compresie hidrostatică plus o alungire uniaxială în direcția x pentru straturile de AlSb. Dacă notăm cu d_1 grosimea stratului de GaSb și cu d_2 grosimea stratului de AlSb, având în vedere că constantele elastice pentru cele două materiale sunt aceleași, se definește parametrul de rețea $a_{\perp}$ al stratului tensionat

$$a_{\perp} = \frac{a_1 d_1 + a_2 d_2}{d_1 + d_2}$$

Tensiunea X care actionează asupra unui strat de GaSb se exprimă în funcție de constantele uzuale K și μ [27]

$$X = (\frac{2}{9K} + \frac{1}{6\mu})^{-1}\frac{a_{\perp} - a_1}{a_{\perp}}$$

această tensiune determină următoarele modificări în structura de benzi a GaSb [28]

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

(1) Tensiunea X produce o dilatare hidrostatică (de volum); aceasta determină micșorarea benzii interzise E_g cu valoarea

$$\Delta E_g = -\frac{\delta E_g}{\delta P} X = -3D_d(S_{11} + 2S_{12})$$

(2) Tensiunea X produce o compresie uniaxială în direcția x care determină o creștere a benzii interzise și o despicare a benzii de valență Γ^8

$$\Delta(E_c-E_{vg})=D_d(S_{11}+2S_{12})X+D_u(S_{11}-S_{12})X$$

$$\Delta(E_c-E_{vu})=D_d(S_{11}+2S_{12})X -D_u(S_{11}-S_{12})X$$

unde E_c este marginea inferioară a benzii de conducție, E_{vg} este marginea superioară a benzii golurilor grele,E_{vu} este marginea superioară a benzii golurilor ușoare, D_d si D_u sunt potențialele de deformație. Prin urmare, prin acțiunea unei tensiuni biaxiale straturile de GaSb au o bandă interzisă între banda de conducție și banda de valență a golurilor ușoare, dată de expresia

$$E_c - E_{vu} = E_g^{GaSb} - 2D_d(S_{11} + 2S_{12})X - D_u(S_{11} - S_{12})X$$

și o bandă interzisă între banda de conducție și banda de valență a golurilor grele, mai mare

$$E_c - E_{vg} = E_g^{GaSb} - 2D_d(S_{11} + 2S_{12})X + D_u(S_{11} - S_{12})X$$

Din acest motiv starea fundamentală din banda de valență este cea a golurilor ușoare. In straturile de AlSb se produce o creștere a lărgimi benzii interzise dintre E_c si E_{gv} și o creștere ceva mai mare a lărgimii benzii interzise între Ec și E_{gu}. Această situație este reprezentată în Fig.2.23a. In Fig.2.23b este reprezentată superrețeaua cu straturi tensionate InGaAs(compresie biaxială)-GaAs(alungire biaxială) iar în Fig.2.23c este reprezentată superrețeaua InAs (alungire biaxială)-GaSb(compresie biaxială). In Fig.2.24a se reprezintă banda interzisă netensionată a $In_xGa_{1-x}As$ în funcție de fracțiunea molară de In (linie intreruptă) precum și despicarea S a benzilor golurilor grele și ușoare datorată tensionării materialului când acesta este depus pe GaAs care are constanta rețelei mai mică) [29]. In Fig.2.24b se reprezintă modificarea barierelor de potențial adiacente văii cuantice când materialul văii cuantice se află sub acțiunea unei tensiuni de compresie. Adâncimea văii cuantice pentru golurile ușoare se micșorează cu despicarea S datorată tensiunii mecanice indusă de către barierele de potențial adiacente. In Fig.2.24a E_h reprezintă banda interzisă relativă la golurile grele iar E_u reprezintă banda interzisă relativă la golurile ușoare. Se observă că despicarea $S=E_u-E_h$ crește liniar cu fracțiunea de Indiu. Banda interzisă a golurilor ușoare devine mai mare decât banda interzisă a golurilor grele. Dacă se consideră, așa cum am amintit mai sus, că bariera de potențial pentru golurile ușoare se micșorează cu S atunci în ecuația masei efective care descrie banda golurilor ușoare se adaugă S la energia potențială [30]. Ecuația (4.7) devine

$$\begin{bmatrix} H_g + U & W \\ W^* & H_u + U + S \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_g \\ F_u \end{bmatrix} = E_v \begin{bmatrix} F_g \\ F_u \end{bmatrix} \qquad (15)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

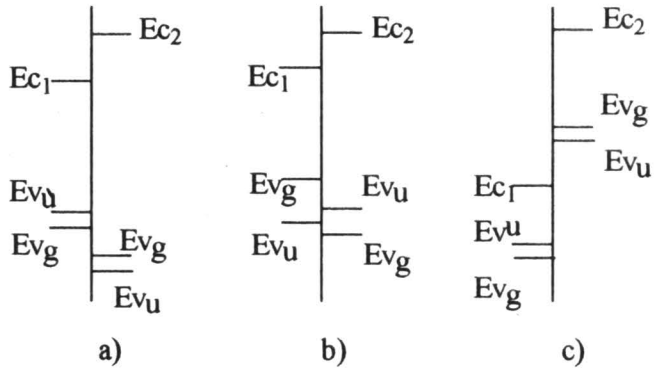


Fig. 2.23

unde U este zero în interiorul iar S este zero în exteriorul văii cuantice.Modul de rezolvare a ec.(15.1) este similar cu cel al ec.(4.7) pentru valea cuantică netensionată.Pentru valea de potenţial $Al_{0,2}Ga_{0,8}As/In_{0,2}Ga_{0,8}As/Al_{0,2}Ga_{0,8}As$ tensionată, cu lărgimea de 8 nm şi adâncimea U_o=175 meV se obţine pe baza acestui calcul structura de benzi de energie reprezentată în fig.2.25.Subbenzile golurilor uşoare sunt deplasate şi mai adânc în valea cuantică de potenţial (a golurior) astfel încât la scara utilizată nu au putut fi reprezentate pe figură (ele sunt situate mai jos în comparaţie cu subbenzile golurilor din structura

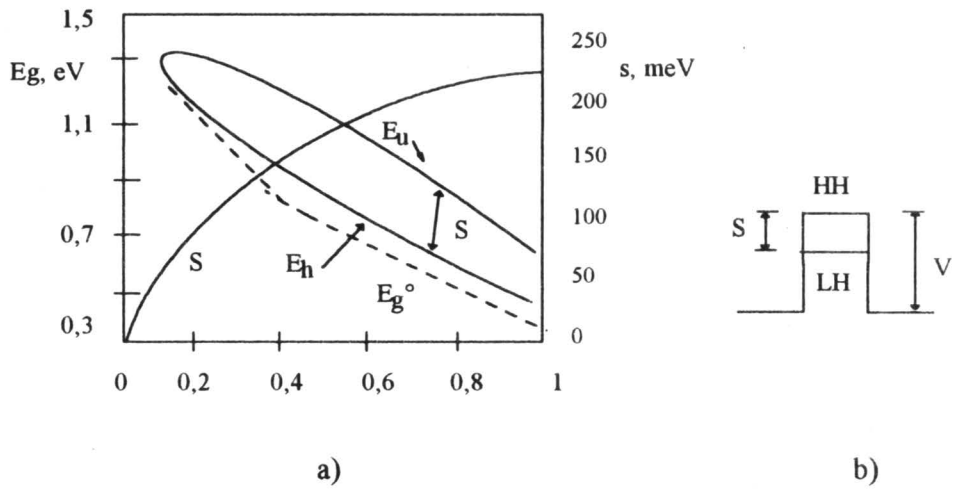


Fig. 2.24

netensionată (Fig. 2.8)). Din această cauză mixarea subbenzilor golurilor grele şi uşoare este diminuată.In Fig. 2.26 a este reprezentată densitatea de stări de energie din banda de valenţă raportată la densitatea de stări de energie din banda de conducţie $g_v(E)/g_c(E)$ pentru valea cuantică netensionată (cu linie plină pentru golurile grele şi cu linie intreruptă pentru golurile uşoare). $g_c(E)$ este densitatea de stări din prima subbandă a benzii de conducăie. Această densitate de stări este corespunzătoare structurii de benzi de energie reprezentată în Fig. 2.8. In Fig. 2.26 b se reprezintă raportul densităţilor de stări de energie $g_v(E)/g_c(E)$ pentru valea de potenţial tensionată cu structura de benzi reprezentată în Fig. 2.25. Se observă că în structura

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

tensionată densitatea de stări este micșorată semnificativ și "acordarea" (apropierea ca valoare) între g_v și g_v este semnificativ îmbunătătită. Această caracteristică a văii de potențial cuantice tensionate determină creșterea amplificării într-o structură laser. Se arată că în superreţeaua $PbTe/Pb_{1-x}Sn_xTe$ cele patru minime echivalente situate pe direcţia [111] a benzii de conducţie devin neechivalene, adică se separă între ele [31]. In continuare discutăm grosimea critică a stratului tensionat. Când un strat tensionat depășește o anumită grosime critică,energia de tensionare este atât de mare încât dă naștere la interfața celor două straturi a unor dislocaţii de discordanţă de reţea. Pentru calculul acestei grosimi critice h_c s-au propus mai multe modele. Unul din acestea se bazează pe egalarea energiei elastice a stratului tensionat cu energia stratului în care au apărut dislocaţii ca urmare a detensionării materialului (energia formării dislocaţiilor) [32]. In acest caz se obţine pentru grosimea critică h_c a unui singur strat tensionat (o structură ce conţine două straturi de constante de reţea diferite, dintre care numai unul este tensionat) expresia

$$h_c = \frac{a}{32\sqrt{2}\pi f^2}\frac{1-\nu}{1+\nu}\ln\left(\frac{h_c\sqrt{2}}{a}\right) \qquad (15.2)$$

unde a este constanta reţelei stratului tensionat . f=δa/a este diferenţa relativă a constantelor de reţea ale celor două straturi, n este raportul Poisson

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11}+C_{12}}$$

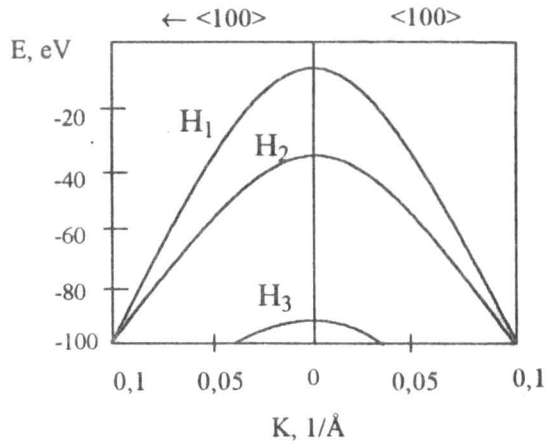


Fig. 2.25

Intr-un alt model [33] se presupune că în strat există iniţial dislocaţii helicoidale care datorită tensionării migrează și se transformă în dislocaţii (marginale) de discordanţă de reţea. In acest caz energia de tensionare datorată discordanţei de reţea generează la interfaţă o forţă F_s

$$F_s = G\left(\frac{1-\nu}{1+\nu}\right)bh\varepsilon$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

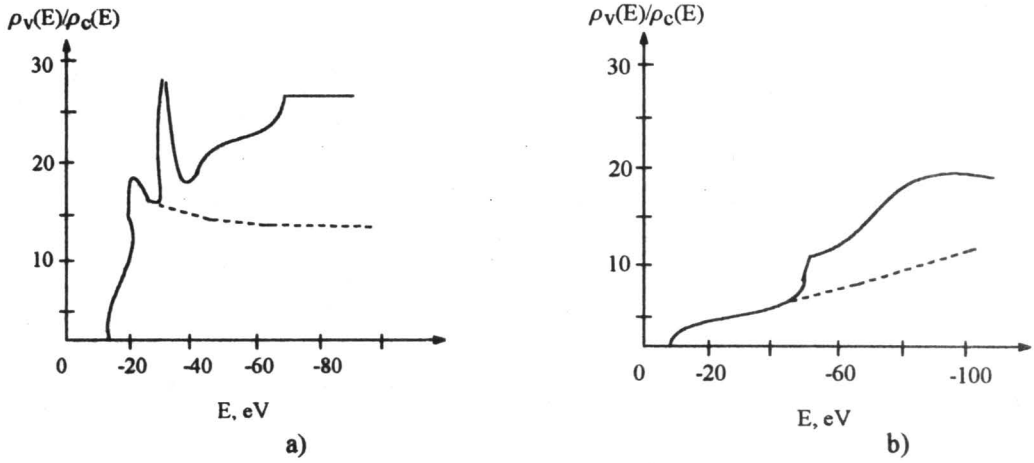


Fig. 2.26

Dacă această fortă depăşeşte tensiunea F_D într-o linie de dislocaţie are loc migrarea dislocaţiei helicoidale şi se formează o dislocaţie de discordanţă de reţea. Tensiunea F_D este dată de expresia

$$F_D = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}[\ln(\frac{h}{b})+1]$$

unde G este modulul de forfecare,b este vectorul lui Burger, ε este mărimea deformării la interfaţă. In cazul unui singur strat tensionat (o singură interfaţă) grosimea critică a stratului se găseşte din egalarea celor două forţe şi o dislocaţie helicoidală dă naştere unei dislocaţii de discordanţă de reţea. In cazul unei văi cuantice de potenţial tensionată, energia de tensionare este aproximativ egală cu energia de dezacord de reţea ca şi în cazul unui singur strat (cu o singură interfaţă) însă prin migrarea unei dislocaţii helicoidale iau naştere două dislocaţii de dezacord de reţea; efectul apare atunci când $F_s>2F_D$. In ambele cazuri am presupus că un singur strat este tensionat iar straturile adiacente sunt suficient de groase ca să nu fie afectate de tensionare. In cazul unei superreţele nu mai există straturi groase, straturile alternative sunt supuse fie la compresie biaxială fie la alungire biaxială şi tensiunea datorată discordanţei de reţea este distribuită pe toate straturile, iar energia de tensionare este egală cu aproximativ jumătate din energia de dezacord de reţea. Grosimea critică a straturilor într-o superreţea este dată de expresia

$$h_c = \frac{a}{\kappa\sqrt{2}\pi f}\frac{1-0{,}25\nu}{1+\nu}[\ln(\frac{h_c\sqrt{2}}{a})+1]$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

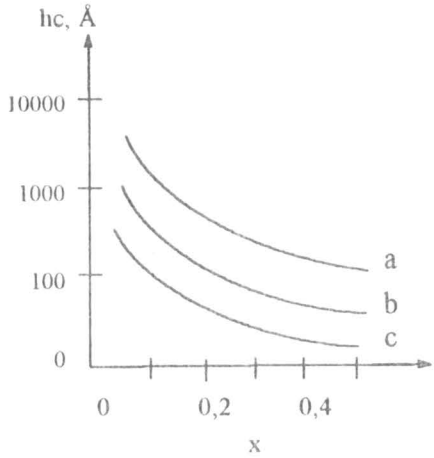


Fig. 2.27

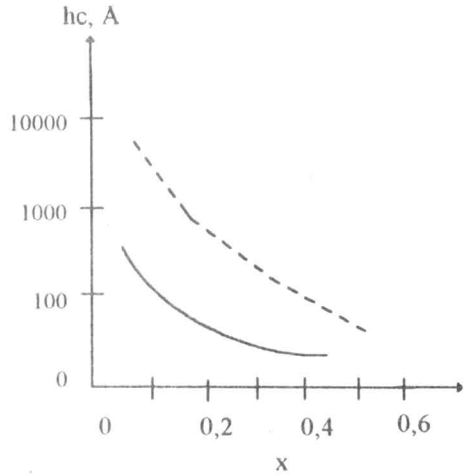


Fig. 2.28

Coeficientul κ are valoarea 1 pentru o superreţea cu straturi tensionate, valoarea 2 pentru o singură vale de poptenţial şi valoarea 4 pentru un strat cu o singură interfaţă şi un singur strat tensionat. Considerăm o structură $In_xGa_{1-x}As/GaAs$. Intre aceste materiale *f* poate să ajunga la valoarea de 3,6% (la x=0,5). In Fig.2.27 se prezintă grosimea critică pentru straturile de $In_xGa_{1-x}As$ care realizează o interfaţă cu GaAs în funcţie de compoziţia x de indiu pentru o superreţea (a), pentru o vale cuantică (b), pentru un strat cu o singură interfaţă (c).Valorile au fost calculate în modelul migrării unor dislocaţii existente iniţial. Pentru compararea rezultatelor obţinute în cadrul acestui model cu rezultatele obţinute în modelul generării dislocaţiilor fără existenţa unor dislocaţii iniţiale în Fig.2.28 se reprezintă grosimea critică a stratului $In_xGa_{1-x}As$ care realizează o interfaţă cu GaAs în funcţie de compoziţia x de indiu. Cu linie plină sunt reprezentate rezultatele obţinute în presupunerea migrării unor disloçaţii helicoidale existente iniţial,iar cu linie întreruptă sunt prezentate rezultatele obţinute pe baza celuilalt model analizat mai sus. Se observă că există o diferenţă apreciabilă între valorile grosimii critice h_c obţinute pe baza celor două modele.Notăm că constanta reţelei compusului ternar $In_xGa_{1-x}As$ variază cu compoziţia x. Aşa cum vom discuta în capitolul IV modificarea structurii electronice datorită tensionării conduce la îmbunătăţirea performanţelor laserilor cu văi cuantice de potenţial.

2.16. *Superreţele cu concentraţia impurităţilor de dopare modulată spaţial.*

Intr-un semiconductor se pot genera purtători de sarcină liberi,electroni sau goluri, în exces faţă de cei obţinuţi prin generare termică bandă-bandă, pe mai multe căi: prin doparea cu impurităţi donoare sau acceptoare, prin aplicarea unei tensiuni pe poarta unui tranzistor MOS, prin transferul electronilor în superreţelele InAs-GaSb, prin generare optică, etc. Spre deosebire de celelalte metode, introducerea de impurităţi donoare sau acceptoare conduce la micşorarea mobilităţii purtătorilor de sarcină datorită împrăştierii acestora pe impurităţi. In superreţele este posibil să se separe spaţial purtătorii de sarcină liberi de impurităţile care i-au generat , dacă se introduc impurităţi de dopare numai în regiunile barierelor de potenţial [32].

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

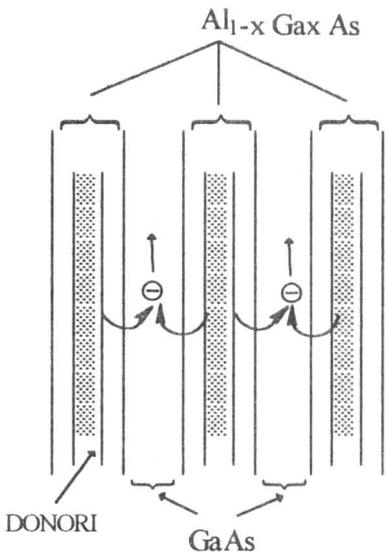


Fig. 2.29

Purtătorii de sarcină liberi, care se acumulează în văile de potenţial, vor suferi mai puţin împrăştierea pe aceste impurităţi (care se găsesc în barierele de potenţial) şi astfel creşte timpul mediu între două coliziuni şi deci mobilitatea purtătorilor de sarcină (prin separarea spaţială a purtătorilor mobili faţă de impurităţi). Primele superreţele cu dopare modulată au fost realizate prin epitaxie cu fascicule moleculare din GaAs/$Al_{1-x}Ga_xAs$ dopat cu siliciu.Schema spaţială a unei asemenea structuri este reprezentată în Fig.2.29. Ariile haşurate reprezintă straturile dopate. Deoarece stările electronilor din văile de potenţial au energie mai mică decât cele din bariere sau de pe donorii din regiunile barierelor, electronii sunt transferaţi de pe donori în văile de potenţial. Are loc astfel confinarea electronilor în văile de potenţial şi separarea acestora de donori.

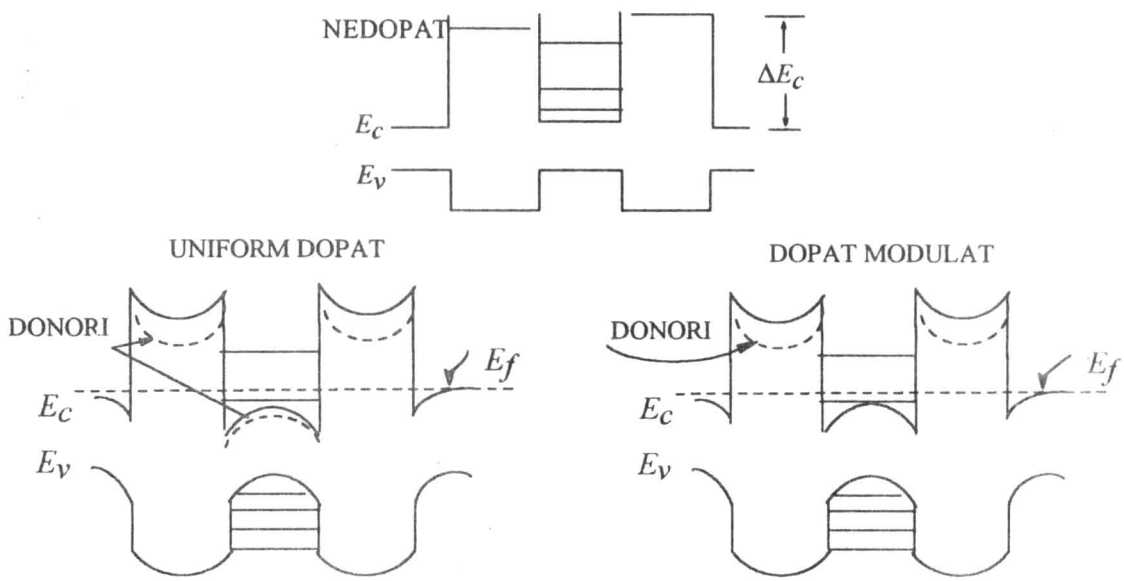


Fig. 2.30

Diagrama de benzi de energie pentru superreţeaua nedopată, uniform-dopată şi dopată modulat este reprezentată în Fig. 2.30. Diferenţa dintre benzile de energie ale $Ga_{1-x}Al_xAs$ şi GaAs este 1,247x eV, astfel că pentru x=0,30 există o discontinuitate între marginile benzilor de conducţie egală cu 0,22 eV şi o discontinuitate între marginile benzilor de valenţă egală cu 0,06 eV. Nivelele donoare sunt situate în banda interzisă a barierei (ne referim la superreţeaua cu dopare modulată) la o distanţă de marginea inferioară a benzii de conducţie a barierei egală cu 50-100 meV pentru x cuprins în domeniul 0,30-0,40. In continuare vom discuta următoarele probleme: (a) transferul de sarcină, (b) potenţialul electrostatic, (c) calculul nivelelor de energie, (d) starea de echilibru termodinamic. Aplicaţia importantă, tranzistorul cu efect de câmp cu dopare modulată,o vom prezenta în cap. VI. Considerăm interfaţa barieră-vale cuantică reprezentată în Fig. 2.31. Presupunem că înainte de a avea loc

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

transferul de sarcină benzile sunt plate. Notăm cu N_D concentraţia donorilor din barieră. In urma transferului electronilor, de densitate n_s, din barieră în valea cuantică, câmpul electric generat de aceşti electroni în valea cuantică poate fi considerat aproximativ constant. Valoarea sa se găseşte din legea lui Gauss

$$\varepsilon F = q n_s \qquad (16.1)$$

Energia potenţială electro-statică în valea cuantică este $U(x)=-q(-Fx)=qFx=q^2 n_s x/e$. Ecuaţia Schrodinger pentru funcţia anvelopă a electronului este în acest caz

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{q^2 n_s}{\varepsilon}x]\chi(x)=E\chi(x)$$

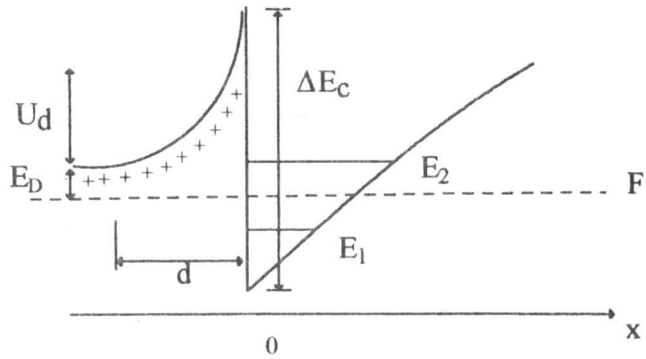


Fig. 2.31

Nivelele de energie ale electronului în valea de potenţial triunghiulară de adâncime infinită sunt date de espresia (5.3)

$$E_{n+1}=(\frac{\hbar^2}{2m})^{1/3}(\frac{3}{2\varepsilon}\pi q^2 n_s)^{2/3}(n+\frac{3}{4})^{2/3}$$

Pentru n=0 se obţine nivelul energetic fundamental

$$E_1=(\frac{\hbar^2}{2m})^{1/3}(\frac{9\pi q^2 n_s}{8\varepsilon})^{2/3}=\gamma n_s^{2/3} \qquad (16.2)$$

Cu creşterea sarcinii transferate, creşte energia potenţială electrostatică de confinare generată de către electronii transferaţi ceea ce determină ridicarea (înălţarea) marginii inferioare E a benzii de conducţie a electronilor din valea de potenţial. Starea de echilibru la T=0K are loc atunci când marginea superioară a stărilor ocupate

$$E=E_1+\frac{n_s}{g_{2D}}=E_1+\frac{\pi\hbar^2 n_s}{m} \qquad (16.3)$$

scrisă astfel atunci când numai o subbandă este ocupată, este egală cu energia Fermi din regiunea barierei (AlGaAs) a hetrojoncţiunii. Nivelul Fermi din AlGaAs este deplasat în jos de către energia potenţială electrostatică ce apare la interfaţă datorită donorilor ionizaţi (care nu mai au sarcina neutralizată de către electronii corespunzători). Pentru dopare uniformă în AlGaAs energia potenţială din stratul de deflexie (de unde au fost transferaţi electronii) se calculează cu ajutorul relaţiei

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$U_D = \int_0^{-d} qFdx = \int_0^{-d} \frac{q^2 N_D x dx}{\varepsilon} = \frac{q^2 N_D d^2}{2\varepsilon} \tag{16.4}$$

unde d este lărgimea stratului de deflexie. Energia măsurată de la marginea inferioară a benzii de conducţie (din valea de potenţial) este

$$\Delta E_c = E_1 + \frac{\pi\hbar^2 n_s}{m} + E_D + U_D \tag{16.5}$$

unde E_D este energiă de legătură a donorilor în AlGaAs. S-a presupus că nivelul donor este suficient da adânc astfel că nivelul Fermi (la 0K) coincide cu acest nivel. In alte situaţii poziţia nivelului Fermi se calculează după procedeul standard. Avand în vedere că $n_s=N_D d$ din (10.5) se obţine o ecuaţie pentru n_s:

$$\Delta E_c - \frac{q^2 n_s^2}{2\varepsilon N_D} - E_D = E_1(n_s) + \frac{n_s \pi\hbar^2}{m} \tag{16.6}$$

Pătrunderea funcţiei de undă a electronului din GaAs (valea de potenţial) în regiunea barierei este neglijabilă, astfel că nivelele sale de energie sunt neafectate practic de către modificarea barierei electrostatice indusă de către transferul de sarcină. Funcţia de undă este determinată numai de către înălţimea barierei şi numai în aproximaţia de ordinul doi este influenţată de către câmpul electric la interfaţă datorat sarcinii deflectate. In mod uzual, între regiunea dopată cu donori şi valea de potenţial se lasă în barieră o regiune nedopată, de grosime d_1. Aceasta conduce la diminuarea interacţiunii Coulomb dintre donorii ionizaţi (din barieră) şi electroni (din valea cuantică) şi la creşterea mobilităţii electronilor. Grosimea acestui strat nu poate să fie prea mare deoarece conduce la micşorarea sarcinii transferate, astfel că are o limitare superioară. In prezenţa acestui strat la echilibru condiţia (16.5) se scrie

$$\Delta E_c = U_D + U_n + E_D + E_1 + \frac{\pi\hbar^2}{m} n_s$$

unde $U_n=q^2 d_1 n_s/\varepsilon$. Aceste probleme vor fi discutate în detaliu la tranzistorul cu efect de câmp de suprafaţă. Un rol important asupra energiei potenţiale electrostatice îl au concentraţiile reziduale de donori şi acceptori din valea de potenţial (GaAs) atunci când concentraţia electronilor transferaţi este mică.In cele de mai sus am prezentat un calcul simplu al nivelelor de energie ale electronului în valea de potenţial. Acestea se pot calcula mai precis, utilizând condiţia de selfconsisitenţă în aproximaţia Hartree folosind funcţii de undă de tipul Fang-Howard. In aproximaţia Hartree, energia de interacţie electron-electron $U_{ee}(x)$ este dată de ecuaţia

$$\frac{d^2 U_{ee}(x)}{dx^2} = \frac{q^2 n_s}{\varepsilon} |\chi(x)|^2$$

care exprimă faptul că un electron "simte" câmpul electrostatic mediu generat de toţi ceilalţi electroni. Ecuaţia Schrodinger se scrie în acest caz

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U_o(x) + U_{imp}(x) + U_{ee}(x)]\chi(x) = E\chi(x)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde U_o si U_{imp} sunt energiile potenţiale din heterojoncţiune şi, respectiv, cea determinată de impurităţile din valea de potenţial. Funcţiile de undă Fang-Howard se iau de forma

$$\chi(x) = Cc^{1/2}(cx + \gamma)\exp(-cx/2), \qquad x > 0$$
$$= C'c'^{1/2}(c'x/2), \qquad x < 0$$

unde C,C',c,c' sunt parametri variaţionali. Utilizând condiţiile de frontieră şi de normare rămân numai doi parametri variaţionali: c şi c'. Cu o bună aproximaţie $c'=2(2m\Delta E)^{1/2}/\hbar$ ceea ce reprezintă penetraţia standard a funcţiei de undă în barieră. Calculul funcţiilor de undă şi valorilor proprii ale energiei se face numeric. Calcule complete, care iau în considerare efectele barierei finite, discontinuităţile maselor efective şi constantele dielectrice la interfaţa precum şi temperatura diferită de zero se găsesc în [33]. In încheiere notăm că la o temperatură diferită de 0K expresia lui n_s care se utilizează în ecuaţiile de mai sus se calculează din relaţia

$$n_s = \int_{E_1}^{\infty} g_{2D} f(E) dE$$

unde f(E) este funcţia de distribuţie Fermi-Dirac. Se obţine

$$n_s = \frac{kTm}{\pi\hbar^2} \ln[1 + \exp\{(E_F - E_1)/kT]$$

2.17. *Superreţele cu structură miltiplă p-i-n i.*

Spre deosebire de superreţelele compoziţionale AlAs/GaAs, InAs/GaSb, etc. în care există interfeţe între văile şi barierele de potenţial, superreţelele cu structură multiplă pn nu posedă asemenea interfeţe şi au proprietăţi deosebite datorită prezenţei benzii interzise indirecte în spaţiul real [34]. Structura se prepară prin metoda epitaxiei cu fascicule moleculare şi constă dintr-o succesiune periodică de straturi subţiri de GaAs de tip n şi de tip p cu perioada cuprinsă între 5 şi 300 nm [35]. Acestea se obţin prin doparea alternativă a GaAs cu impurităţi donoare (Si) şi acceptoare (Be); s e poate folosi pentru dopare şi o singură surs\ă care conţine un element amfoter din grupa a IV-a(Ge). In timpul preparării substratul se menţine la tmeperatura de 550°C.In general între straturile n şi p se interpun straturi intrinseci din GaAs şi în acest caz structura devine o superreţea nipi. Regiunea i poate avea grosime foarte mică. Schema unei superreţele nipi este reprezentată în Fig.2.32a. In Fig.2.32b este reprezentată distribuţia impurităţilor de dopare donoare şi, respectiv, acceptoare. Electronii de

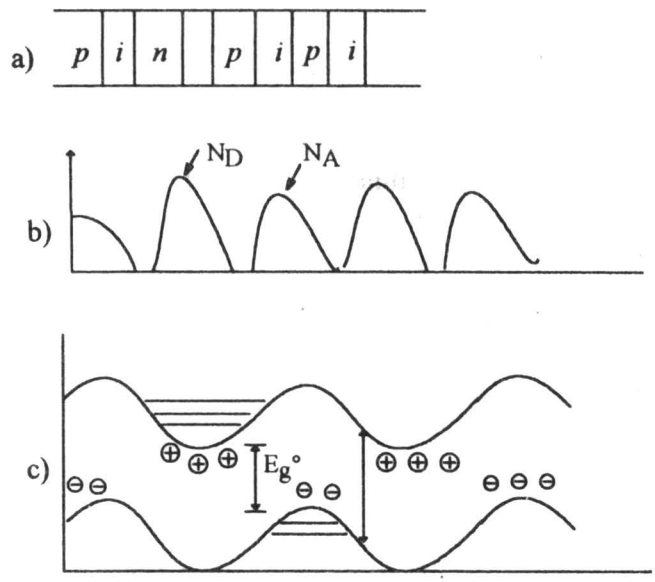


Fig. 2.32

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

pe donori trec pe acceptori dând naştere unei sarcini spaţiale sucesive pozitive şi negative, de impurităţi ionizate. Datorită variaţiei periodice a sarcinii impurităţilor ionizate potenţialul superreţelei variază periodic în direcţia succesiunii straturilor, ceea ce determină o modulare periodică a benzilor de energie (Fi.2.32c). Energia potenţială electrostatică este dată de expresia

$$U(x)=U_{imp}(x)+U_H(x)+U_{sc}(x)$$

unde $U_{imp}(x)$ este energia potenţială electrostatică dată de impurităţile ionizate, U_H este energia potenţială Hartree a electronilor şi golurilor şi U_{sc} este energia potenţială de schimb şi de corelaţie. $U_{imp}(x)$ se găseşte rezolvând ecuaţia Poisson

$$\frac{d^2U_{imp}(x)}{dx^2}=\frac{q^2}{\varepsilon}[N_D(x)-N_A(x)]$$

Energia potenţială Hartree se calculează din ecuaţia Poisson

$$\frac{d^2U_H(x)}{dx^2}=-\frac{q^2}{\varepsilon}[|\chi_e^2(x)|+|\chi_g^2(x)|]$$

Energia potenţială de schimb şi de corelaţie este dată de expresia [38]

$$U_{sc}(x)=0{,}611\frac{q^2}{\varepsilon}\left(\frac{4\pi}{3n(x)}\right)^{1/3}$$

unde n(x) este densitatea electronilor. In potenţialul periodic benzile de energie se despică în subbenzi la fel ca în superreţeaua compoziţională. Subbenzile de energie E_o,E_1,E_2,"se găsesc rezolvând ecuaţia Schrodinger

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x)]\chi_e(x)=E\chi_e(x) \qquad (17.1)$$

unde $\chi_e(x)$ este funcţia anvelopă pentru electroni. Subbenzile de energie din banda de valenţă se găsesc scriind o ecuaţie nanloagă pentru goluri (în ec.(17.1) se înlocuieşte $\chi_e(x)$ cu $\chi_g(x)$-funcţia anvelopă pentru goluri). Un calcul corect presupune rezolvarea simultană a ec. Poisson şi a ec.Schrodinger deoarece în ec. Poisson pentru potenţialul Hartree este conţinută în densitatea de sarcină funcţia de undă (calcul selfconsistent). Concluzii utile se pot oţtine în unele cazuri simplificate. In cazul compensaţiei complete a donorilor şi acceptorilor

$$\int_{-d_n/2}^{d_n/2}N_D(x)dx=\int_{-d_p/2}^{d_p/2}N_A(x)dx$$

nu există purtători de sarcină liberi în structură la temperaturi joase. Presupunând o structură cu $d_n=d_p,N_D=N_A$, care nu conţine regiuni intrinseci, energia potenţială are forma periodică parabolică cu amplitudinea

$$U_o=\frac{q^2}{8\varepsilon}N_Dd_n^2 \qquad (17.2)$$

In GaAs pentru $N_D=N_A=10^{18}cm^{-3}$ si d_n=50 nm se obţine U_o=450 meV. In cazul potenţialului de forma parabolică

$$U(x)=\frac{q^2}{8\varepsilon}N_Dx^2$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

valorile proprii ale energiei obținute prin rezolvarea ecuației Schrodinger sunt nivelele oscilatorului armonic

$$E_n = \hbar\left(\frac{q^2 N_D}{\varepsilon m}\right)^{1/2}\left(n+\frac{1}{2}\right) \qquad (17.3)$$

pentru subbenzile de energie din banda de conducție unde n=0,1,2,3,.. O relație similară se obține pentru subbenzile din banda de valență. Densitatea de stări se obține prin suprapunerea contribuției tuturor subbenzilor. In aproximația masei efective fiecare subbandă contribuie cu o valoare constantă, $m/\pi\hbar^2$, la densitatea de stări. Banda interzisă efectivă a superrețelei, care este egală cu diferența dintre marginea inferioară a benzii de conducție din stratul n și marginea superioară a benzii de valernță din stratul p, poate avea valoarea cuprinsă între zero și valoarea E_{go} a benzii interzise a GaAs masiv (Fig.2.32b). Această valoare depinde de grosimile straturilor și de concentrațiile impurităților de dopare și se determină din expresia

$$E_g = E_{go} - 2U_o + E_{co} + E_{vo} \qquad (17.4)$$

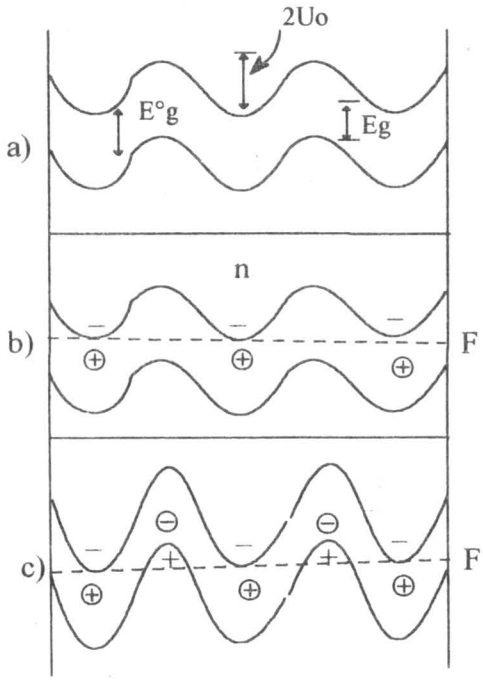


Fig. 2.33

unde E_{co} este dat de relația (11.3) pentru n=0 iar E_{vo} este dat de o relație similară (se substituie N_D cu N_A iar m reprezintă masa golurilor). Dacă $N_D d_n > N_a d_p$, straturile p nu conțin purtători de sarcină liberi iar regiunile n conțin fiecare o densitate de electroni egală cu $N_D d_n - N_a d_p$ si superrețeaua este de tip n (Fig.2.33b). In cazul $N_a d_p > N_D d_n$ superrețeaua este de tip p. Daca $N_D d_n$ si $N_a d_p$ au valori mari (d>70 nm, $N_D = N_A = 10^{18} cm^3$) potențialul determinat de sarcina spațială este mare si $2U_o$ poate atinge valoarea maximă, care este puțin mai mare decât E_{go},lărgimea benzii interzise a materialului masiv, astfel că banda interzisă efectivă poate deveni negativă (Fig.2.33c). In acest caz în starea fundamentală există electroni liberi în regiunile n și goluri libere în regiunile p iar structura este similară unui semimetal. Pentru comparație, în Fig. 2.33a este reprezentată structura de benzi pentru rețeaua intrinsecă compensată, $N_D d_n = N_a d_p$ si $2U_o < E_{go}$. Injectia purtătorilor de sarcină de neechilibru se poate face electric sau optic.In cazul injecției electrice un contact ohmic este aplicat pe regiunile n iar regiunile p sunt izolate de acesta, iar celălalt contact ohmic este aplicat pe regiunile p iar regiunile n sunt izolate de acesta. Contactele ohmice se realizează prin aliere cu bobițe mici de Sn pentru regiunile n și cu Sn/Zn pentru regiunile p. Se atașează,de asemenea, electrozi separați pentru măsurarea conductanței straturilor n și, respectiv, p. La polarizare directă crește concentrația purtătorilor de sarcină (electroni și goluri) și deci cresc conductanțele straturilor constituiente ale structurii cu creșterea tensiunii aplicate. Electronii și golurile în exces micșorează densitatea de sarcină spațială inițială și deci, amplitudinea U_o, ceea ce conduce la creșterea lărgimii benzii interzise. Lărgimea benzii interzise crește cu valoarea

$$\Delta E_g = \frac{q^2 d_n}{\varepsilon}\Delta n$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde, datorită condiţiei macroscopice de neutralitate electrică, $\Delta n = \Delta p$. Deoarece electronii şi golurile sunt confinaţi în straturi diferite, alternative, aceştia sunt separaţi spaţial cu o semiperioadă a reţelei. Astfel structura prezintă o banda interzisă indirectă în spaţiul real ceea ce determină creşterea la o valoare foarte mare (~30s) a timpului de viaţă a purtătorilor de sarcină generaţi în exces faţă de purtătorii de echilibru. Ca o consecinţă a acestui fapt,abateri mari ale concentraţiei purtătorilor de sarcină de la valoarea de echilibru termic pot fi considerate cuasistabile. La polarizare inversă purtătorii sunt deflectaţi, sunt extraşi din straturi,ceea ce conduce la creşterea lui U_o şi la micşorarea lui E_g. Pentru o anumită valoare a tensiunii aplicată la polarizare inversă, straturile n sau p pot fi golite complet de purtători liberi. Astfel, dacă $N_a d_p > N_D d_n$ la valoarea V_p straturile n sunt complet golite iar concentraţia golurilor în straturile p se micşorează la valoarea minimă

$$p_{min} = N_a d_p - N_D d_n \quad (cm^{-2})$$

In cazul invers, $N_D d_n > N_a d_p$, la valoarea V_p a tensiunii aplicate straturile p sunt complet golite iar concentraţia electronilor în straturile n se micşorează la valoarea minimă

$$n_{min} = N_D d_n - N_a d_p \qquad (cm^{-2})$$

Altă metodă de generare a purtătorilor de sarcină liberi este prin absorbţie optică. Perechile electron-gol generate prin absorbţia fotonilor sunt separate de către sarcina spaţială existentă şi colectate în straturile respective (electronii în regiunile n şi golurile în regiunile p). Datorită ratei foarte mici de recombinare (timpului de viaţă mare) concentraţiile purtătorilor liberi cresc cu durata iluminării. Purtătorii de sarcină liberi compensează sarcina spaţială data de impurităţi determinând micşorarea stratului de sarcină spaţială corespunzător fiecărui strat al structurii şi în consecinţă creşte rata de recombinare a electronilor din straturile n cu golurile din straturile p. In final sistemul ajunge la o stare staţionară în care pierderile prin recombinare compensează generarea prin absorbţie optică . Absorbţia optică este posibilă pentru fotoni de energie hν egală sau mai mare decât valoarea efectivă E_g a benzii interzise. Pentru superreţelele cu perioada mare şi concentraţie de dopare moderată elementele de matrice ale tranziţiei dintre subbenzile superioare din banda de valenţă şi subbenzile inferioare din banda de conducţie au valori extrem de mici,datorită slabei suprapuneri a funcţiilor de undă ale purtătorilor de sarcină. Elementele de matrice cresc exponenţial cu creşterea lui hν către valoarea E_{go} şi în consecinţă coeficientul de absorbţie creşte exponenţial cu hν în acest domeniu de energie. Efectele iluminării structurii au fost studiate efectuându-se măsurători de conductanţă, efect Hall, tensiune fotovoltaică. Menţionăm contribuţiile cercetătorilor români în domeniul structurilor cuantice [36].

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Bibliografie

1. G.Bastard, in Molecular beam epitaxy and heterostructures, NATO ASI Series, 1985.
2. V.Dolocan, Fenomene de tunelare si aplicatii, Edit. Stiintifica si Enciclopedica, 1989.
3. M.Schummans, G.Hooft, Phys. Rev. B 31, 8041 (1985)
4. G.Bastard, Phys. Rev.B 24, 5693 (1981).
5. J.Luttinger, W. Kohn. Phys. Rev. 97, 869 (1955).
6. E.O.Kane, J.Phys. Chem. Sol. 1, 82 (1956).
7. D.A.Brodo, L.J.Sham, Phys. Rev. B 31, 888 (1985).
8. S.W.Corzine, R.H.You, L.A.Coldren, in " Quantum well lasers", ed.P.S.Zory. Jr., Academic Press, 1993.
9. S.Vlaev, V.Velasco, F. Garcia-Moliner, Phys. Rev. B50, 4577 (1994)
10. E.O.Kane, in "Tunneling Phenomena in Solids", Plenum Press, 1969.
11. V.Dolocan, C.Vasilescu, Rev. Roum. Phys. 29, 389 (1984).
12. N.Schulman,Y.C.Chang, Phys.Rev. B 24,44445(1981).
13. L.Esaki,in "Recent Topics in Semiconductor Physics" ed. H.Kamimura,Y.Toyozawa, World Scientific Pub. Co., 1983
14. M.Chen, S.Xiong, Q.Wang, Phys. Rev. B, 49, 14736 (1994).
15. M.Sujawara,T.Fujii,S.Yamazaki ,,K.Nakajima, Appl.Phys. Lett., 54, 1353 (1989).
16. U.Cebulla, G.Bacher, A.Farchel, G.Mayer, W.T.Tang, Phys. Rev. B39 6257 (1983).
17. R.Dingle,in "Adv.Solid State Phys." ed. H.J.Queisser, Pergamon-Wieneg, vol.XV, 1975.
18. R.L.Greche, K.K.Bajaj, Solid State Comm., 45, 831 (1988).
19. E.L.Ivchenko, G.Pikus, Superlattices and other heterostructures, Solid state Sciences 110, Springer-Verlag,1995.
20. Q. Jiang,C.Wen, Phys. Rev. B50, 2689 (1994).
21. A.Chomete et al , Europhys. Lett. 4, 461 (1987)
22. Q.X.Zhao et al, Phys. Rev. B50, 4476 (1994).
23. C.Mailhot, Y.Chang, T.M.Gill, Phys. Rev. B20, 4449 (1982).
24. W.T.Masselink, Y.C.Chang,H.Morkoc, Phys. Rev. B32, 5190 (1985).
25. N.F.Gashimzade, F.L.Ivchenko, V.A.Kasobrukin, Fiz.Tekh.Poluprovod. 23, 389 (1989).
26. P.Voisin,in "Two-dimensional systema, heterostructures and superlattices", Springer-Verlag, 1984. 27. J.R. Drabble, in "Semiconductors and Semimetals" ed.R.K. Williardson, A.C.Beer, Academic Press, 1966.
28. M.Pollak, M.Cardona, Phys. Rev. 172, 8161 (1968).
29. E.J.Fautner, C.Bauer, in "Two-dimensional Systems, Heterostructures and Superlattices", Springer-Verlag, 1984.
30. R.People, J.C.Benn, Appl. Phys. Lett. 47, 322 (1985).
31. J.W.Matthews, A.E.Blakeslee, J.Cryst.Growth, 27, 118 (1974).
32. R.Dingle, H.Stormer, A.C.Gossard, R.Wiegmann, Appl. Phys. Lett. 33, 665 (1978).
33. F.Stern, S. Das Sarma, Phys.Rev. B30, 840 (1984)
34. G.H.Dohler, Phys. Stat. Sol. B52, 72, 533 (1972)
35. K.Ploog in "Two-Dimensional Systems,Heterostructures and Superlattices", Solid-State Science 53,Springer-Verlag,1984
36. R.Loo,L.Vescan, A.Hartman, L.Apetz, P.Gartner, U.Zastrow, A.Leuther, T.Stoica, C.Dieker, H.Luth, Phys. Rev, B50, 18113 (1994).

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Capitolul III

Proprietãţile optice

3.1. *Tranziţii optice bandã-bandã*

Câmpul electromagnetic poate fi descris cu ajutorul potenţialului vector **A**(**r**,t) şi cu ajutorul potenţialului scalar φ(**r**,t). Aceste două potenţiale electromagnetice pot fi definite cu ajutorul unei transformări gradient astfel cã este posibil sã luãm potenţialul scalar φ(**r**,t) =0. In acest caz câmpul electric **F** şi inducţia magneticã **B** sunt definite prin relaţiile

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}; \qquad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \tag{1.1}$$

Se poate, de asemenea, impune condiţia Lorentz

$$\mathrm{div}\mathbf{A}=0 \tag{1.2}$$

In acest caz **A**(**r**,t) va satisface ecuaţia undelor.Hamiltonianul care descrie mişcarea electronului de sarcinã -q în potenţialul periodic al reţelei cristaline -U(r)/q este dat de relaţia

$$H = \frac{1}{2m_o}[\hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}]^2 + U(r) \tag{1.3}$$

unde $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ este operatorul impuls, **r** este vectorul de poziţie şi m este masa electronului liber. Funcţiile de undã Ψ ale electronului în banda de conducţie şi de valenţã se gãsesc rezolvând ecuaţia lui Schrodinger

$$H\Psi=E\Psi \tag{1.4}$$

care corelează Hamiltonianul reţelei cristaline cu energia electronului. Interacţiunea undei electromagnetice cu electronul apare în ecuaţia Schrodinger prin potenialul vector, care este dat de expresia

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \mathbf{e}_o\,\mathrm{Re}[A(\mathbf{r})e^{-i\omega t}] = \mathbf{e}_o\cdot\frac{1}{2}[A(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + A^*(\mathbf{r})e^{i\omega t}] \tag{1.5}$$

unde $\mathbf{e}_o$ este vectorul de polarizare în direcţia lui **A** şi ω este frecvenţa unghiularã a fotonului. Notând cu k vectorul de undã al fotonului,se poate scrie

$$A(\mathbf{r}) = A_o e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}} \tag{1.6}$$

şi

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \mathbf{e}_o |A_o| \cos(\boldsymbol{\kappa}.\mathbf{r} - \omega t) \tag{1.7}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde s-a presupus $A_o=A_o^*=|A_o|$.Mărimea $|A_o|$ poate fi corelată cu densitatea de energie a fotonilor $N\hbar\omega$.Valoarea reală a intensității câmpului electric este dată de expresia

$$F=-\frac{\partial A}{\partial t}=-\omega|A_o|\sin(\kappa.\mathbf{r}-\omega t)$$

Intr-un mediu nemagnetic, izotrop din punct de vedere optic densitatea de energie elctromagnetică mediată în timp este dată de expresia

$$\frac{1}{2}(\varepsilon<F^2>+\frac{<B^2>}{\mu})=\varepsilon F^2=\varepsilon\omega^2|A_o|^2<\sin^2(\kappa.\mathbf{r}-\omega t)>=\frac{1}{2}\varepsilon\omega^2|A_o|^2$$

Am utilizat faptul că pentru o undă electromagnetică plană energia electrică medie $<eE^2>$ este egală cu energia magnetică medie $<B^2/\mu>$ si $<\sin^2(\mathbf{k.r}-\omega t)>=1/2$. Egalând această expresie a densității energiei cu densitatea de energie a fotonilor se obține

$$|A_o|=\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2N\hbar\omega}{\varepsilon}}=\frac{n}{\kappa c}\sqrt{\frac{2N\hbar\omega}{\varepsilon}} \qquad (1.8)$$

unde $k=\omega/v$ este vectorul de undă și $v=c/n$. In expresia (1.3) a Hamiltonianului se poate scrie

$$[\hat{\mathbf{p}}+q\mathbf{A}]^2=\hat{\mathbf{p}}^2+q\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A}+q\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}+q^2\mathbf{A}^2=\hat{\mathbf{p}}^2+2q\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}+q^2\mathbf{A}^2\approx\hat{\mathbf{p}}^2+2q\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} \qquad (1.9)$$

unde am neglijat termenul ce conține pătratul potențialului vector deoarece acesta nu afectează rezultatele finale (întrucât funcțiile de undă sunt ortogonale, operatorul $\mathbf{A}^2$ nu perturbă sistemul ,în presupunerea că neglijăm variația spațială a lui **A** în interiorul unei celule unitate).In deducerea relației (1.9) am utilizat relația $\hat{\mathbf{p}}.\mathbf{A}=\mathbf{A}.\hat{\mathbf{p}}-i\hbar\mathrm{div}\mathbf{A}$ și condiția (1.2). Substituind (1.9) în (1.3) vom scrie Hamiltonianul sub forma

$$H=H_o+[H'e^{-i\omega t}+c.c.];\qquad H_o=\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_o}+U(r);\qquad H'=\frac{q}{2m_o}\mathbf{A}(\mathbf{r})\mathbf{e}_o.\hat{\mathbf{p}} \qquad (1.10)$$

unde c.c. reprezintă conjugata complexă a termenului e^{-iwt} si a lui $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ cu excepția lui $\hat{\mathbf{p}}$. H' reprezintă Hamiltonianul de perturbație datorită interacției electronului cu radiația electromagnetică. Starea electronului în banda de conducție și, respectiv, de valență este descrisă de funcții de undă de forma

$$\Psi c(\mathbf{r})=u_c(\mathbf{r})F_c(\mathbf{r})$$
$$\Psi_v(\mathbf{r})=u_v(\mathbf{r})F_v(\mathbf{r}) \qquad (1.11)$$

unde F_c si F_v sunt funcțiile anvelopă, care se deosebesc de câmpul electric, F.Elementul de matrice al energiei de perturbație pentru tranziția din banda de valență în banda de conducție corelată cu absorbția unui foton se scrie

$$H'_{cv}=\int_V\Psi_c^*H'\Psi_v d^3\mathbf{r}=\frac{q}{2m_o}\int F_c^*u_c^*(A(\mathbf{r})\mathbf{e}_o.\hat{\mathbf{p}})F_vu_vd^3\mathbf{r}=$$
$$\frac{q}{2m_o}\{\int_V u_c^*u_vF_c^*(A(\mathbf{r})\mathbf{e}_o\hat{\mathbf{p}})F_vd^3\mathbf{r}+\int_V[F_c^*A(\mathbf{r})F_v]u_c^*\mathbf{e}_o.\hat{\mathbf{p}}u_vd^3\mathbf{r}\} \qquad (1.12)$$

Prima integrală din interiorul parantezelor se anulează datorită condiției de ortogonalitate a funcțiilor Bloch,

$$<u_v|u_c>=<u_c|u_v>=0$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

precum şi datoritã faptului cã ceilalţi termeni de sub integralã sunt cu bunã aproximaţie constanţi într-o celulã unitate. Pentru a evalua cea de a doua integralã din interiorul parantezelor (1.12) împărţim integrala pe volumul cristalului într-o sumã de integrale pe o celulã unitate

$$H'_{cv} = \frac{q}{2m_o}\sum_j [F_c^* A(\mathbf{r}) F_v]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_j} \int_{\Omega_o} u_c^* \mathbf{e}_o . \hat{\mathbf{p}} u_v d\tau$$

unde W_o este volumul celulei unitate.Sumarea dupã j se face pe numãrul total de celule unitate şi $\mathbf{r}_j$ este vectorul de poziţie al celulei unitate j. Deoarece funcţiile Bloch u se repetã în fiecare celulã unitate integrala poate fi scoasã în afara sumei şi se obţine

$$H'_{cv} = \frac{q}{2m_o}\left(\frac{1}{\Omega_o}\int_{\Omega_o} u_c^* \mathbf{e}_o . \hat{\mathbf{p}} u_v d\tau\right)\sum_j [F_c^* A(\mathbf{r}) F_v]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_j} . \Omega_o =$$

$$\frac{q}{2m_o} < u_c | \mathbf{e}_o . \hat{\mathbf{p}} | u_v > \int_V F_c^* A(\mathbf{r}) F_v d^3\mathbf{r} \qquad (1.13)$$

unde am trecut din nou de la sumã la integralã presupunând volumul celulei unitate foarte mic. Integrala de suprapunere a funcţiilor anvelopã din (1.13) este generalã. Ea poate fi particularizatã pentru diverse cazuri. In cazul tranziţiilor bandã-bandã din semiconductorul masiv $F_v=(1/\sqrt{V})e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}}$, $F_c=(1/\sqrt{V})e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}}$ şi pentru $A(\mathbf{r}) = |A_o| e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ integrala care conţine funcţiile anvelopã se scrie

$$\int_V F_c^* A(\mathbf{r}) F_v d^3\mathbf{r} = \frac{1}{V}|A_o| \int e^{i(\mathbf{k}_1 + \boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \qquad (1.14)$$

Considerãm $\mathbf{r}=\mathbf{r}'+\mathbf{a}_n$ unde $\mathbf{a}_n$ este vectorul nodului n al reţelei şi $\mathbf{r}'$ ia valori numai în interiorul unei celule unitate.Integrala (1.14) poate fi scrisã

$$\frac{1}{V}\sum_n \exp\{i(\mathbf{k}_1 + \boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_2).\mathbf{a}_n\} \int \exp\{i(\mathbf{k}_1 + \boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_2)\mathbf{r}'\} d^3\mathbf{r}' \qquad (1.15)$$

Integrala dupã $\mathbf{r}'$ se efectueazã pe volumul W_o al unei celule unitate. Se poate demonstra cã

$$\sum_n \exp\{i(\mathbf{k}_1 + \boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_2).\mathbf{a}_n\} = N_c \delta_{0,\mathbf{k}_1 + \boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_2} = \frac{V}{\Omega_o}\delta_{0,\mathbf{k}_1 + \boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_2}$$

unde N_c este numãrul de celule unitate din cristal iar

$$\delta_{0,\mathbf{k}_1 + \boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_2} = \begin{cases} 0, & \mathbf{k}_1 + \boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_2 \neq 0 \\ 1, & \mathbf{k}_1 + \boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}_2 = 0 \end{cases}$$

este simbolul d al lui Kronecker.Aceastã relaţie exprimã legea conservãrii impulsului în tranziţiile bandã-bandã,

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k} - \mathbf{k}_2 = 0 \qquad (1.16)$$

Deoarece $\mathbf{k}$ este mic în comparaţie cu $\mathbf{k}_1$ şi $\mathbf{k}_2$ se scrie

$$\mathbf{k} \approx 0;\ \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}.$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

S-a presupus cã vectorii $\mathbf{k}_1$ si $\mathbf{k}_2$ se gãsesc în aceeași zonã Brillouin. Având în vedere (1.16) integrala din expresia (1.15) are valoarea unitate deoarece $\int d^3\mathbf{r}'=W_o$ și elementul de matrice (1.13) al tranziției bandã-bandã în semiconductorul masiv (cazul 3D) devine

$$H'_{cv} = \frac{q|A_o|}{2m_o} < u_c|\mathbf{e}_o\mathbf{p}|u_v > \tag{1.17}$$

Altfel stau lucrurile în cazul tranziției dintre douã nivele discrete (de fapt subbenzi) din valea cuanticã de potențial situatã de-a lungul direcției x (cazul 2D). Deoarece lãrgimea vãii de potențial este mult mai micã decât lungimea de undã a radiației se poate considera cã potențialul vector este constant în regiunea vãii, adicã $A(\mathbf{r})=|A_o|$,astfel cã

$$\int_V F_c^* A(\mathbf{r}) F_v d^3\mathbf{r} \approx |A_o| \int F_c^* F_v dx = |A_o| < F_c|F_v > \tag{1.18}$$

Forma funcțiilor anvelopã în valea cuanticã este datã în cap. II. Funcțiile anvelopã din planul stratului vãii (direcțiile y si z) se considerã unde plane și prin urmare, conservarea vectorului de undã $\mathbf{k}$ în aceste direcții este satisfãcutã la fel ca în cazul semiconductorului masiv. Prin urmare, integrala din plan este egalã cu unitatea ceea ce justificã trecerea de la integrala pe volum în (1.18) la integrala dupã direcția x. In acest caz modulul pãtrat al relației (1.13) devine

$$|H'_{cv}|^2 = (\frac{q|A_o|}{2m_o})^2 |< u_c|\mathbf{e}_o\hat{\mathbf{p}}|u_v >|^2 |< F_c|F_v >|^2 \tag{1.19}$$

Datoritã ortogonalitãții funcțiilor de undã ,în valea cuanticã de potențial de adâncime infinitã sunt permise numai tranzițiile între stãrile din banda de valenţã și stãrile din banda de conducție cu același numãr cuantic n (regula $\Delta n=0$); pentru același numãr cuantic, $|<F_c|F_v>|^2=1$. Insa pentru $n_c \neq n_v$, numere cuantice diferite,se obține $|<F_c|F_v>|^2=0$, aceste tranziții fiind interzise. Totuși, în valea cuanticã de potențial cu pereți finiți, aceastã regulã de selecție nu este satisfacutã riguros și pot avea loc tranziții interzise de aceastã regulã însã cu intensitate foarte slabã:$|<F_c|F_v>|^2 \approx 0\text{-}0,1$ pentru n_c diferit de n_v. O altã regulã de simetrie este cea legatã de simetria funcțiilor anvelopã în raport cu reflexia spațialã (parã sau imparã). Sunt permise numai tranzițiile între stãrile confinate cu aceeași simetrie a funcțiilor anvelopã. Chiar în vãile cuantice de potențial de adâncime finitã sunt interzise tranzițiile între funcțiile simetrice (de tip cosinus) și funcțiile antisimetrice (de tip sinus) deoarece funcțiile simetrice și antisimetrice sunt totdeauna ortogonale între ele. Intr-un paragraf urmãtor vom prezenta regulile de selecție referitoare la funcțiile de undã Bloch periodice u_c și u_v și la elementul de matrice al tranziției pentru impuls

$$\mathbf{p}_{vc} =< u_c|\hat{\mathbf{p}}|u_v > \tag{1.20}$$

care apare în relația (1.19), care poate fi scrisã

$$|H'_{vc}|^2 = (\frac{q|A_o|}{2m_o})^2 |\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{vc}|^2 |< F_c|F_v >|^2 \tag{1.21}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

3.2. *Coeficientul de absorbție*

Rata totală de tranziție, adică numărul de tranziții din banda de valență (v) în banda de conducție (c), în unitatea de timp, pe unitatea de volum în condițiile în care sunt satisfăcute legile de conservare a energiei (E_c=E_v+hn) și impulsului ($\mathbf{k}_1$=$\mathbf{k}_2$) este dată de expresia

$$W_{vc} = \frac{2\pi}{\hbar}\int |H'_{vc}|^2 \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega) g(k) dk$$

Facem substituția $\eta = E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - \hbar\omega$ astfel că relația de mai sus se poate scrie

$$W_{vc} = \frac{2\pi}{\hbar}\int |H'_{vc}|^2 \delta(\eta) g(\mathbf{k}) \frac{d\eta}{(dE_{cv}/dk)} = \frac{2\pi}{\hbar}|H'_{vc}|^2 \left[\frac{g(k)}{dE_{cv}/dk}\right]_{E_{cv}=\hbar\omega} \qquad (2.1)$$

unde am notat E_{cv}=E_c-E_v

$$E_{cv} = E_c - E_v = E_{co} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_c} - (E_{vo} - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_v}) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}$$

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v}$$

Am utilizat condiția $\mathbf{k}_1$=$\mathbf{k}_2$ iar E_g=E_{co}-E_{vo} este definită ca bandă interzisă dintre două subbenzi date din valea cuantică din banda de conducție și respectiv de valență. Am presupus benzile de formă parabolică. Termenul cuprins între parantezele drepte în ec, (2.1) se numește densitate redusă de stări

$$g(E) = \frac{g(k)}{dE_{cv}/dk} \equiv g(E_{cv} - E_g); \qquad \frac{dE_{cv}}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m_r}$$

Prin urmare,

$$W_{v\to c} = \frac{2\pi}{\hbar}|H'_{vc}|^2 g(E_{cv} - E_g) \qquad (2.2)$$

unde E_{cv}=$\hbar\omega$.Am interpretat E=E_{cv}-E_g.In scrierea relației (2.2) am presupus că banda de valență (de unde pleacă electronul) este complet plină cu electroni iar banda de conducție (unde sosește electronul) este complet liberă. Această presupunere este corectă atunci când E_g>>kT. Numărul de fotoni absorbiți în unitatea de timp pe unitatea de volum este egal cu numărul de tranziții W_{vc}. Dacă prin semiconductor se propagă o undă electromagnetică plană densitatea de flux de fotoni (numărul de fotoni pe unitatea de suprafață și pe secundă) este Nv=Nc/$\bar{n}$ unde N este numărul de fotoni pe unitatea de volum și v este viteza de grup a undei care este egală cu raportul dintre viteza luminii în vid c și indicele de refracție de grup $\bar{n}$. Definim coeficientul de absorbție

$$\alpha = \frac{W_{vc}}{Nv} = \frac{2\pi\bar{n}}{N\hbar c}|H'_{vc}|^2 g(\hbar\omega - E_g) \qquad (2.3)$$

Având în vedere relațiile (1.8) si (1.21) și scriind densitatea de stări

$$g(\hbar\omega - E_g) = \frac{m_r}{\pi\hbar^2}\frac{1}{L}\Theta(\hbar\omega - E_g) \qquad (2.4)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde $\Theta(x)$ este funcţia treaptă, egală cu 1 pentru $x>0$ şi egală cu 0 pentru $x<0$. Coeficientul de absorbţie dintre o subbandă din banda de valenţă şi o subbandă din banda de conducţie a văii cuantice de potenţial este

$$\alpha = \frac{\bar{n}q^2 m_r}{cm^2 \varepsilon \hbar^2 L\omega} |\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{vc}|^2 |< F_c|F_v >|^2 \Theta(\hbar\omega - E_g) \tag{2.5}$$

unde L este lărgimea văii cuantice şi ω este frecvenţa unghiulară a radiaţiei. Deci coeficientul de absorbţie prezintă un maxim la energia fotonilor egală cu intervalul de energie dintre subbenzile între care are loc tranziţia. Unii autori substituie pe ε cu $\varepsilon_o n^2$ unde n este indicele de refracţie relativ la viteza de fază a undei şi ε_o este permitivitatea vidului. Dacă ţinem cont de ocuparea cu electroni a nivelurilor de energie atunci relaţiile de mai sus se modifică

$$W_{vc} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{vc}|^2 g(\hbar\omega - E_g) f_v (1 - f_c) \tag{2.5a}$$

unde

$$f_c = \frac{1}{e^{(E_e - E_{Fe})/kT} + 1}$$

este probabilitatea de ocupare cu electroni a stărilor din banda de conducţie şi

$$f_v = \frac{1}{e^{(E_h - E_{Fh})/kT} + 1}$$

este probabilitatea de ocupare cu electroni a stărilor din banda de valenta

$$E_e = E_c + (E_{cv} - E_g)\frac{m_r}{m_c}$$

$$E_h = E_v - (E_{cv} - E_g)\frac{m_r}{m_v}$$

E_{Fe} şi E_{Fh} sunt nivelele Fermi, m_r este masa redusă, m_c este masa electronilor şi m_v este masa golurilor. De asemenea, şi expresia lui α se înmulţeşte cu produsul $f_v(1-f_c)$. Dacă tranziţia are loc de pe nivele din banda de conducţie pe nivele din banda de valenţă atunci se emite radiaţie şi rata de tranziţie se scrie

$$W_{cv} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{cv}|^2 g(\hbar\omega - E_g) f_c (1 - f_v) \tag{2.6}$$

unde $|H'_{cv}| = |H'_{vc}|$.

3.3. *Elementul de matrice al tranziţiei de dipol*

In aproximaţia dipolului electric Hamiltonianul de interacţie H′ dat de ecuaţia (1.10) se înlocuieşte cu $-q\mathbf{F}.\mathbf{r}$ unde **F** este câmpul electric şi **r** este vectorul de poziţie. In acest caz

$$H'_{cv} = -q \int_V \Psi_c^* F \mathbf{e}_o . \mathbf{r} \Psi_v d^3\mathbf{r} \tag{3.1}$$

Se poate arăta că elementul de matrice al tranziţiei scris în paragraful 3.1

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$H'_{cv} = \frac{q}{2m_o}\int_V \Psi_c^* A(\mathbf{r})\mathbf{e}_o.\hat{\mathbf{p}}\Psi_v d^3\mathbf{r} \tag{3.2}$$

este egal cu elementul de matrice al dipolului electric. Scriem relaţia

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = i\omega|A_o|\mathbf{e}_o \sin(\kappa\mathbf{r} - \omega t) = \frac{i\omega|A_o|}{2}[\exp i(\omega t - \kappa\mathbf{r}) - \exp(-i(\omega t - \kappa\mathbf{r}))] =$$
$$i\omega\mathbf{e}_o\frac{1}{2}[A(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + A^*(\mathbf{r})e^{i\omega t}] \tag{3.3}$$

pentru unda planã. Operatorul $\hat{\mathbf{p}}$ poate fi scris

$$\hat{\mathbf{p}} = m_o\mathbf{v} = m_o\frac{d\mathbf{r}}{dt} = m_o\frac{1}{i\hbar}(\mathbf{r}H - H\mathbf{r}) \tag{3.4}$$

unde am utilizat expresia pentru derivata temporalã a unui operator. H este Hamiltonianul sistemului. Substituind (3.3) si (3.4) în (3.2) se obţine

$$H'_{cv} = -\frac{q}{\hbar\omega}\int_V \Psi_c^* F\mathbf{e}_o(\mathbf{r}H - H\mathbf{r})\Psi_v d^3\mathbf{r} = \langle c|F\mathbf{e}_o\mathbf{r}H|v\rangle - \langle c|F\mathbf{e}_o H\mathbf{r}|v\rangle =$$
$$-\frac{q}{\hbar\omega}\sum_l\{\langle c|F\mathbf{e}_o\mathbf{r}|l\rangle\langle l|H|v\rangle - \langle c|H|l\rangle\langle l|F\mathbf{e}_o\mathbf{r}|v\rangle\} =$$
$$-\frac{q}{\hbar\omega}\{E_v\langle c|F\mathbf{e}_o\mathbf{r}|v\rangle - E_c\langle c|F\mathbf{e}_o\mathbf{r}|v\rangle\} = \frac{q}{\hbar\omega}(E_c - E_v)\langle c|F\mathbf{e}_o\mathbf{r}|v\rangle =$$
$$= -q\int_V \Psi_c^* F\mathbf{e}_o.\mathbf{r}\Psi_v d^3\mathbf{r}$$

care coincide cu expresia (3.1). Am utilizat relaţiile

$$\langle l|H|v\rangle = \int \Psi_l^* H\Psi_v d^3\mathbf{r} = E_v\int \Psi_l^*\Psi_v d^3\mathbf{r} = E_v\delta_{lv}$$
$$\langle c|H|l\rangle = E_c\delta_{cl}; \qquad E_c - E_v = \hbar\omega$$

Pentru calculul elementului de matrice scris sub forma (3.1) se procedează în mod similar ca pentru calculul elementului de matrice scris sub forma (3.2) (paragraful 3.1). Presupunând cã F variazã foarte slab cu **r** pe lãrgimea vãii de potenţial îl scoatem în afara integralei astfel cã expresia (3.1) se scrie

$$H'_{cv} = -qF\int_V F_c(x)e^{i\mathbf{k}_{ct}\mathbf{r}_t}u_c(\mathbf{r})\mathbf{e}_o.\mathbf{r}F_v(x)e^{i\mathbf{k}_{vt}\cdot\mathbf{r}_t}u_v(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \tag{3.5}$$

Se consideră funcţiile de undă din planul stratului văii cuantice de forma $e^{i\mathbf{k}_t\cdot\mathbf{r}_t}$, $\mathbf{k}_{ct}$ şi $\mathbf{k}_{tv}$ sunt vectorii de undă ai electronilor şi golurilor în planul stratului văii cuantice, $F_c(x)$ şi $F_v(x)$ sunt funcţiile anvelopă iar u_c şi u_v sunt funcţiile Bloch uzuale. In Fig.3.1 sunt reprezentate $F_c(x)$ şi $u_c(\mathbf{r})$ precum şi **r** în valea cuantică de potenţial. Se remarcă schimbarea semnului lui $u_v(\mathbf{r})$ la fiecare nod al reţelei,ambele alternanţe dând contribuţii egale la momentul total de dipol.Se observă pe figură că funcţiile $u_c(\mathbf{r})$ şi $u_v(\mathbf{r})$ sunt rapid variabile pe o distanţă egală cu constanta a a reţelei cristaline, pe când funcţiile anvelopă sunt lent variabile (o semiperioadă pe lăţimea L a văii cuantice).

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Transformăm integrala (3.5) într-o sumă de integrale din funcţiile Bloch pe celula elementară. Notând centrul unei celule elementare cu $\mathbf{R}_i$ scriem

$$H'_{cv} = -qF\sum_{\mathbf{R}_i} F_c(\mathbf{R}_i)F_v(\mathbf{R}_i)e^{i(\mathbf{k}_{ct}-\mathbf{k}_{vt})\mathbf{R}_i}\int_{\Omega_o} u_c(\mathbf{r})\mathbf{e}_o.\mathbf{r}u_v(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \qquad (3.6)$$

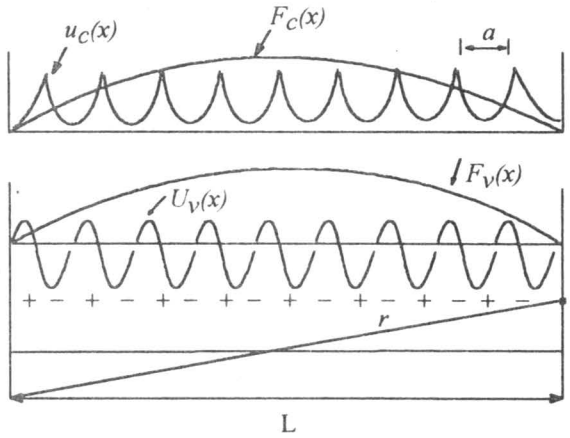


Fig. 3.1

Sumarea pe componentele transversale ale vectorului de undă dă valoare diferită de zero numai pentru $\mathbf{k}_{ct}=\mathbf{k}_{vt}$.Pentru $\mathbf{e}_o.\mathbf{r}=x$ relaţia (3.6) devine

$$H'_{vc} = -qF\sum F_c(\mathbf{R}_i)F_v(\mathbf{R}_i).a[\frac{1}{a}\int u_c(x)xu_v(x)dx]$$

Trecând din nou de la sumă la integrală se obţine

$$H'_{cv} = -qF\int F_c(x)F_v(x)dx[\frac{1}{a}\int u_c(x)xu_v(x)dx] \sim -qFa$$

Integrala pe funcţiile anvelopă este egală cu unitatea atunci când tranziţia are loc între stări cuantice din banda de valenţă şi din banda de conducţie cu acelaşi număr cunatic n, când F_c şi F_v sunt identice [$\sim\sin(\pi k\hat{x}/L)$] şi normate la unitate. Rata de tranziţie şi coeficientul de absorbţie se calculează ca în paragrafele precedente. Pentru caracterizarea tăriei tranziţiilor optice se defineşte mărimea numită forţa sau tăria oscilatorului

$$f = 2\frac{|< c|\mathbf{e}_o.\hat{\mathbf{p}}|v >|^2}{m\hbar\omega} = \frac{2m\omega}{\hbar}|< c|\mathbf{e}_o.\mathbf{r}|v >|^2 \qquad (3.7)$$

Permitivitatea se scrie (vezi Anexa)

$$\varepsilon(\omega)=1+\sum_j \frac{4\pi q^2}{m}\frac{f_j}{(\omega_j-\omega)^2-i\gamma_j\omega} \qquad (3.8)$$

unde sumarea se face pe toate cele j tranziţii optice iar g_j este o constantă de atenuare (fenomenologică). De asemenea, în funcţie de forţa oscilatorului, absorbţia integrală pe o linie de absorbţie se scrie

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$\int \alpha(E)dE = \frac{\pi q^2 h}{m\bar{n}c} f \qquad (3.9)$$

unde $\bar{n}$ este indicele de refracţie.

3.4. *Tranziţii între subbenzi din aceeaşi bandã de energie*

Prin absorbţia fotonilor pot avea loc tranziţii între subbenzile electronilor din banda de conducţie sau între subbenzile golurilor din banda de valenţã, aşa cum se reprezintã în Fig. 3.2. In acest caz elementul de matrice al tranziţiei se scrie

$$H'_{cv} = -qF\int_V \Psi_c^* \mathbf{e}_o \mathbf{r} \Psi_c' d^3\mathbf{r} \qquad (4.1)$$

unde

$$\Psi_c = F_c u_c \quad , \quad \Psi_c' = F_c' u_c$$

sunt funcţiile de undã ale electronilor de pe nivelele E_2 şi, respectiv, E_1. Aceste funcţii sunt reprezentate în Fig.3.3. Trecând de la integralã la o sumã de integrale pe celula unitate şi apoi din nou la integralã, prin acelaşi procedeu ca în paragraful precedent, ec. (4.1) devine

$$H'_{cv} = -qF\int F_c(x)\mathbf{e}_o.\mathbf{r}F_c'(x)dx \int_{\Omega_o} u_c^*(\mathbf{r})u_c(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}.\frac{1}{\Omega_o} \qquad (4.2)$$

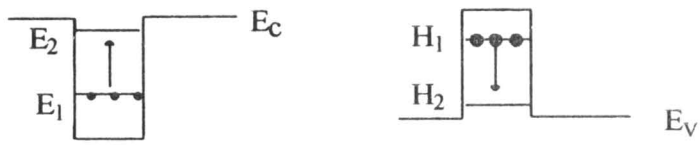


Fig. 3.2

Integrala din functiile Bloch u_c este egalã cu unitatea. Deoarece în acest caz funcţiile Bloch u_c au aceeaşi comportare periodicã (Fig.3.3) dacã am introduce pe **r** în aceastã integralã elementul de matrice ar fi zero.Calculul elementului de matrice (4.2) al tranziţiei conduce la rezultatul

$$H'_{cv} = -qF < x >= -qF\frac{16}{9\pi^2}L \approx -0{,}18qFL \qquad (4.3)$$

valoare mult mai mare decât în cazul tranziţiei între subbenzile din banda de valenţã şi cea de conducţie.Acest efect "gigant" este utilizat la construcţia de detectori de radiaţie, la generarea armonicii a doua şi la redresarea opticã. Forţa oscilatorului are în acest caz valoarea foarte mare, apropiatã de unitate,

$$f = \frac{2m}{\hbar^2}(E_2 - E_1) < x >^2 = \frac{256}{27\pi^2} = 0{,}96 \qquad (4.4)$$

unde <x> reprezintã produsul celor douã integrale din (4.2). Relatia (4.4) a fost scrisã pentru valea de potenţial infinit de adâncã în care nivelele de energie sunt date de expresia

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$E_n = (\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2})n^2$$

$$E_2 - E_1 = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

Absorbția integrală este dată de expresia

$$\int \alpha(E)dE = \frac{n_s N q^2 hf}{4\varepsilon_o mcn}\frac{\sin^2\theta}{\cos\theta} \qquad (4.5)$$

unde n_s este densitatea, pe unitatea de suprafață, a purtătorilor de sarcină (este egală cu concentrația, pe unitatea de volum, înmulțită cu lărgimea văii cuantice), n este numărul de văi dopate, n este indicele de refracție, θ este unghiul dintre direcția fascicolului optic și normala la suprafață. Notăm că deoarece tăria oscilatorului, f, area numai o componentă, cea de-a lungul axei x, este necesar ca și câmpul electric al undei electromagnetice să aibă o componentă paralelă cu axa x pentru a induce absorbția intersubbenzi; radiația la incidenta normală (θ=0) nu este absorbită. Această limitare este înlăturată prin realizarea unui cuplaj optic eficient, de exemplu cu ajutorul unei rețele optice. La unghiul de incidență Brewsters (θ_B=73^0) componenta câmpului electric orientată de-a lungul direcției de creștere a stratului subțire (axa x) este mare. La l=8mm absorbția este 5%,ceea ce corespunde forței oscilatorului apropiată de unitate. Utilizând un ghid de undă multiplu- pas s-a mărit coeficientul de absorbție cu două ordine de mărime (față de cazul fără ghid) ceea ce permite măsurarea cu precizie a forței oscilatorului, a formei liniei de absorbție, verificarea regulii de selecție legată de polarizarea luminii chiar într-o structură cu o singură vale cuantică. Regula de selecție legată de polarizarea luminii este $\alpha \sim \cos^2\varphi$, unde φ este unghiul dintre câmpul electric optic și direcția x.($\mathbf{e}_o.\mathbf{r}$=xcosφ). Absorbția se anulează la φ=90^0, adică atunci când lumina este polarizată în planul văii de potențial. Absorbția se anulează la φ=90^0 adică atunci când lumina este polarizată în planul văii de potențial. Verificarea acestei reguli de selecție se poate face pentru lumina incidentă la unghi θ_B=73^0 și variind unghiul de polarizare φ sau cu lumina polarizată în planul de incidență și variind unghiul de incidență θ. In valea cuantică rectangulară simplă modificarea nivelelor de energie se poate obține prin modificarea lărgimii văii și a adâncimii sale. Dacă se introduce o barieră adițională în interiorul văii de potențial (Fig.3.4) obținem două văi cuantice cuplate strâns.In acest caz distanța E_n-E_1 (n=2,3,") scade față de cazul văii cuantice simple deoarece nivelul fundamental E_1 se ridică în sus în valea cuantică asimetrică pe când nivelele excitate E_2,E_3,E_4, sunt mai puțin afectate. Valea cuantică reprezentată în Fig.3.4 se mai numește și valea cuantică în treaptă. In valea cuantică simetrică

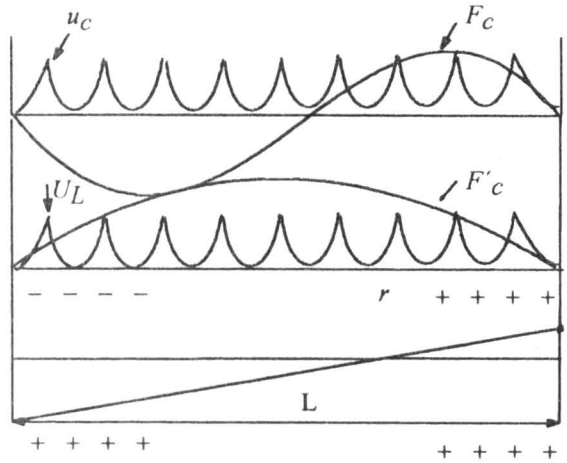


Fig. 3.3

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

(valea cuanticã simplã) sunt permise numai tranziţiile pentru care Δn este impar (n fiind numãrul cuantic al nivelului din valea de potenţial). In valea de potenţial asimetricã o asemenea restricţie este eliminatã. In structura reprezentatã în Fig.3.4 s-a gãsit cã forţa oscilatorului pentru tranziţia 1-3 (în mod uzual interzisã) la hν=150 meV reprezintã 65% din tranziţia 1-2 (la 112 meV), care este permisã în mod normal[1].De asemenea, în valea cuanticã asimetricã deplasarea în câmp electric a marginii absorbţiei intersubbenzi este cu un ordin de mãrime mai mare decât în valea rectangularã. Pentru o valoare a câmpului electric de 15kV/cm s-a gãsit o deplasare liniarã Stark de ~ 10 meV [2].In valea de potenţial rectangularã simetricã deplasarea în câmp electric a marginii absorbţiei intersubbenzi este relativ slabã deoarece, aşa cum rezultã din condiţiile de simetrie, termenul de deplasare liniar este nul.

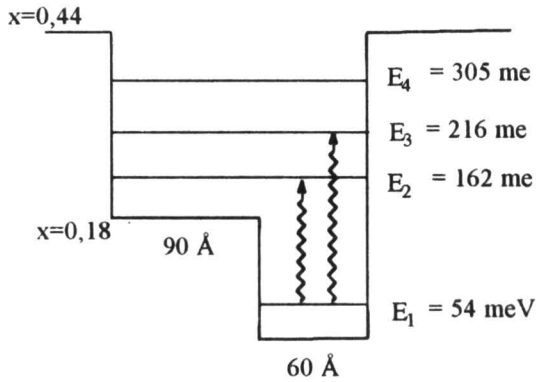


Fig. 3.4

3.5. *Efectele excitonice*

In Fig. 3.5 se reprezintã spectrul de absorbţie în GaAs masiv (curba a) şi într-o superreţea cu 50 perioade formatã din vãi de GaAs cu lãrgimea de 10 nm şi bariere din $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ cu lãrgimea de 10 nm, la temperatura camerei. In semiconductorul masiv apare un pic slab la marginea benzii datorat unei reminiscenţe de excitoni disociaţi termic. Picul excitonic ascuţit din valea cuanticã de potenţial (curba b) se datoreazã unui cuplaj rezonant puternic între radiaţie şi material. In cazul excitonilor 2D apar douã efecte importante faţã de excitonii 3D: (a) Aşa cum am menţionat în cap. 2 creşterea energiei de legãturã conduce la picuri excitonice de absorbţie bine definite chiar la temperatura camerei şi lãrgimea picului datoratã ionizãrii excitonilor prin împrãştierea pe fononi LO este de 1,5 meV, mai micã decât Ry=9

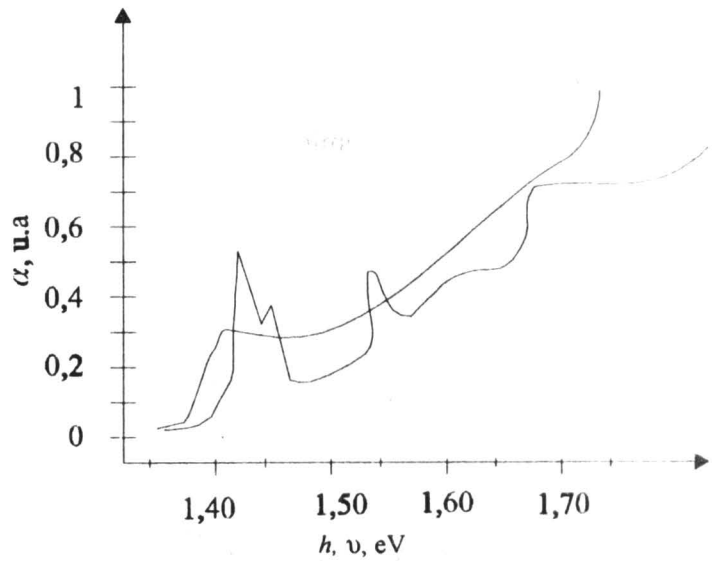


Fig. 3.5

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

meV.(b) Datoritã micşorării razei Bohr a excitonului 2D forţa oscilatorului este mult mai mare, ceea ce face ca picul absorbţiei integrale $\int\alpha(h\nu)d(h\nu)$ să fie de 16 ori mai mare faţă de excitonul 3D. Apare natural, şi este confirmat de analiza detaliată a lui Eliot, cã pentru a lua în considerare interacţia Coulomb trebuie sã introducem în integrandul elementului de matrice H_{cv}' calculat pentru tranziţia intersubbenzi, factorul de pondere egal cu raportul dintre modulul pãtrat al funcţiei $G_{n,l}(r)$ datã de (2.9.10) calculatã în r=0 şi modulul pãtrat al funcţiei de undã plane care descrie mişcarea liberã. Deoarece, aşa cum rezultã din (9.10) funcţia de undã excitonicã se anulează pentru $|l|\neq 1$, numai stãrile cu $|l|=1$ participã la tranziţii. Pentru tranziţiile pe stări excitonice discrete

$$\frac{|G_{no}(0)|^2}{|\Psi_k|^2}=\frac{1}{\pi a^2(n+\frac{1}{2})^3} \tag{5.1}$$

astfel cã forţa oscilatoruluii (3.7) devine

$$f=\frac{2m\omega|<u_c|\mathbf{e}_o.\mathbf{r}|u_v>|^2}{\hbar}\frac{8}{\pi a_B^{*2}L} \tag{5.2}$$

pentru n=0 (nivelul fundamental al excitonului) unde a_B^* este raza Bohr a excitonului în materialul cu permitivitate ε. Elementul de matrice din (5.2) este definit la **k**=0. De fapt expresia (5.1) reprezintã integrala pe funcţiile anvelopã (care sunt în acest caz funcţiile G_{no}) din expresia elementului de matrice al tranziţiei (de exemplu (3.6)),

$$\frac{2}{m\hbar\omega}|<c|\mathbf{e}_o.\hat{\mathbf{p}}|v>|^2=\frac{2}{m\hbar\omega}|<u_c|\mathbf{e}_o.\hat{\mathbf{p}}|u_v>|^2|<F_c|F_v>|^2=$$

$$\frac{2}{m\hbar\omega}|<u_c|\mathbf{e}_o\hat{\mathbf{p}}|u_v>|^2|G_{no}(0)|^2\equiv\frac{2m\omega}{\hbar}|<u_c|\mathbf{e}_o.\mathbf{r}|u_v|^2|G_{no}(0)|^2$$

In cazul tridimensional, pentru nivelul excitonic fundamental se obţine

$$f=\frac{2m\omega}{\hbar}|<u_c|\mathbf{e}_o.\mathbf{r}|u_v|^2\frac{1}{\pi a_B^{*3}} \tag{5.30}$$

Se observã cã tãria oscilatorului, f, este de 8 ori mai mare în cazul 2D faţã de cazul 3D. Absorbţia integralã pe o linie de absorbţie este datã de expresia (3.9). Coeficientul de absorbţie este definit de relaţia (2.3) unde densitatea de stări pentru valori mari ale lui n, unde se poate presupune cã stãrile sunt distribuite cuasicontinuu, este datã de expresia

$$g(\hbar\omega-E_o)=\frac{2}{L}\left|(\varepsilon\frac{\partial E}{\partial n})^{-1}\right|=\frac{(n+\frac{1}{2})^3}{LE_i}$$

$$E_i=\frac{\mu q^4}{2\hbar^2\varepsilon^2}$$

Se poate scrie

$$\alpha=\frac{2\pi\bar{n}}{N\hbar c}\frac{q^2}{4m^2}\frac{1}{\omega^2}\frac{2N\hbar\omega}{\varepsilon}|\mathbf{e}_o.\mathbf{p}_{vc}|^2\frac{(n+\frac{1}{2})^3}{L\mu q^4\frac{1}{2\hbar^2\varepsilon^2}}\delta(\hbar\omega-E_o)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Având în vedere ca

$$|< F_c|F_v >|^2 = |G_{no}(0)|^2 = \frac{1}{\pi a_B^{*2}(n+\frac{1}{2})^3}$$

se obţine

$$\alpha = \frac{2\varepsilon\bar{n}\hbar^2}{\mu q^2 c m^2 \omega a_B^{*2} L}|\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{vc}|^2 \delta_{\hbar\omega - E_o,0} \tag{5.3}$$

unde $E_o=E_g+E_{ex}$,iar E_{ex} este datã de ec.(2.9.10) şi este mai micã decât zero. Se observã cã coeficientul de absorbţie nu depinde de numãrul cuantic n, ceea ce apare natural. Deosebirea faţã de cazul tridimensional (spectrul excitonic discret) este cã la numitorul expresiei apare $a_B^{*2}L$ în loc de a_B^{*3}. In cazul stãrilor excitonice nelegate, cu spectrul de energie continuu, $E_{ex}>0$ se obţine (a se vedea Anexa)

$$|G_{ko}(0)|^2 = \frac{e^{\pi\beta}}{\cosh \pi\beta} = |< F_c|F_v >|^2; \qquad \beta = \frac{1}{a_B^* k} \tag{5.4}$$

unde k este vectorul de undã,energia excitonului $E_{ex}=\hbar^2 k^2 / 2\mu > 0$. Densitatea de stãri în acest caz este datã de funcţia treaptã

$$g(\hbar\omega - E_o) = \frac{\mu}{\pi\hbar^2}\Theta(\hbar\omega - E_o)\frac{1}{L} \tag{5.5}$$

Substituind (5.4) şi (5.5) in (2.3) se obţine valoarea coeficientului de absorbţie

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\bar{n} q^2 \mu}{m^2 \varepsilon \omega \hbar^2 L}\frac{e^{\pi\beta}}{\cosh \pi\beta}|\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{vc}|^2 \delta_{E_o - \hbar\omega,0} \\ \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} &= E_o - E_g = \hbar\omega - E_g = E_{ex}; \qquad \beta = \frac{\hbar}{a_B^* \sqrt{2\mu(\hbar\omega - E_g)}} \end{aligned} \tag{5.6}$$

Acesta este coeficientul de absorbţie excitonicã în spectrul continuu din valea cuanticã de potenţial(2D). In cazul excitonilor tridimensionali din spectrul continuu (a se vedea Anexa)

$$|G_k(0)|^2 = \frac{\pi\beta e^{\pi\beta}}{\sinh \pi\beta}$$

se obţine

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{\pi}\frac{q^2}{m^2 c\omega}|\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{vc}(0)|^2 \int \delta[\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} - (\hbar\omega - E_g)] 4\pi k^2 \frac{(\pi / a_B^* k)\exp(\pi / a_B^* k)}{\sinh(\pi / a_B^* k)} dk = \\ &\frac{2\pi q^2}{\bar{n} m^2 \omega c}(\frac{2\mu}{\hbar^2})^{3/2}|\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{vc}(0)|^2 E_{ex}^{1/2}\frac{e^z}{\sinh z}; \; z = \sqrt{\frac{E_{ex}}{\hbar\omega - E_g}} \end{aligned} \tag{5.7}$$

In apropierea marginii de absorbţie $\hbar\omega - E_g << E_{ex}$,z>>1 şi efectul interacţiunii Coulomb este mare. In cazul limitã când $\hbar\omega \to E_g$, adica z→∞, coeficientul de absorbţie nu tinde la zero ca în cazul amsorbţiei bandã-bandã neexcitonice, $\alpha \sim (\hbar\omega - E_g)^{1/2}$ ci are o valoare finitã

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$\alpha_{3D} = \frac{4\pi q^2}{\bar{n} m^2 c\omega}\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^{3/2}\left|\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{cv}(0)\right|^2 E_{ex}^{1/2}$$

De aceea se observã un maxim excitonic ascuţit la marginea benzii de absorbţie.La distanţe mai mari de marginea de absorbţie, $\hbar\omega - E_g >> E_{ex}$, interacţiunea Coulomb este mai puţin importantã. Comparând coeficientul de absorbţie excitonicã (5.6) din valea cuanticã de potenţial cu expresia (2.5) a absorbţiei intersubbenzi, neexcitonicã, se obţine

$$\frac{\alpha_{2D}^{ex}}{\alpha_{2D}} = \frac{e^{\pi\beta}}{\cosh \pi\beta}$$

pentru stãrile excitonice din spectrul continuu.Saturarea ratei de absorbţie excitonicã datoritã umplerii stãrilor energetice este prezentatã în [3]; teoria spectrului de absorbţie a excitonilor cu energia situatã deasupra barierelor într-o superreţea este prezentatã în [4]; observarea excitonilor liberi şi a excitonilor legaţi în heterostructuri cu dopare modulatã este prezentatã în [5].

3.6 *Emisia radiaţiei. Rata de emisie spontanã*

Am vãzut în paragraful 3.2 cã dacã tranziţia are loc de pe nivele din banda de conducţie pe nivele din banda de valenţã, se emite radiaţie şi rata de tranziţie este datã de expresia (2.6). Modulul pãtrat al elementului de matrice al tranziţiei din banda de valenţã în banda de conducţie

$$\left|H'_{vc}\right|^2 = \frac{q^2}{4m^2}\frac{1}{\omega^2}\frac{2N\hbar\omega}{\varepsilon}\left|\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{vc}\right|^2 \left|< F_c|F_v >\right|^2 \qquad (6.1)$$

este proporţional cu $N\hbar\omega$ aşa cum reiese din relaţiile (1.21) şi (1.8) unde N este densitatea fotonilor de energie $\hbar\omega$. Un calcul exact, efectuat pe baza mecanicii cuantice,aratã cã expresia (6.1) este valabilã numai pentru tranziţiile din banda de valenţã în banda de conducţie (absorbţie) iar în cazul tranziţiilor din banda de conducţie în banda de valenţã (emisie) modulul pãtrat al elementului de matrice este proporţional cu $(N+1)\hbar\omega$.Prin urmare,

$$\left|H'_{cv}\right|^2 = \frac{q^2}{4m^2}\frac{1}{\omega^2}\frac{2(N+1)\hbar\omega}{\varepsilon}\left|\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{cv}\right|^2 \left|< F_v|F_c >\right|^2 \qquad (6.2)$$

Termenul proporţional cu $N\hbar\omega$ din expresia (6.20 reprezintã termenul de emisie stimulatã iar termenul proporţional cu $1\hbar\omega$ reprezintã termenul de emisie spontanã, care este independent de intensitatea fotonilor. Rata de emisie spontanã este datã de relaţia (2.6)

$$W'_{cv} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|H'_{cv}\right|^2 g(\hbar\omega - E_g) f_c(1 - f_v) \qquad (6.3)$$

unde

$$\left|H'_{cv}\right|^2 = \frac{q^2}{4m^2}\frac{1}{\omega^2}\frac{2\hbar\omega}{\varepsilon}\left|\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{cv}\right|^2 \left|< F_v|F_c >\right|^2$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Rata de emisie spontanã totalã pe unitatea de volum într-un interval de energie $d(\hbar\omega)$ se gãseşte multiplicând expresia (6.3) cu numãrul de moduri optice $\rho(\hbar\omega)d(\hbar\omega)$ din intervalul de energie considerat,

$$R_{sp}(\hbar\omega)d(\hbar\omega) = W_{cv}[\rho(\hbar\omega)d(\hbar\omega)]$$

Se obţine

$$R_{sp}(\hbar\omega) = \frac{1}{\hbar\omega}\frac{\pi q^2\hbar}{\varepsilon m^2}|e_o \cdot p_{cv}|^2 |< F_v|F_c >|^2 g(\hbar\omega - E_g)\rho(\hbar\omega)f_c(1-f_v) \qquad (6.4)$$

Densitatea redusã de stări a electronilor şi golurilor este datã de expresia (2.4)

$$g(\hbar\omega - E_g) = \frac{m_r}{\pi\hbar^2}\frac{1}{L}\Theta(\hbar\omega - E_g)$$

Notãm cã m_r este masa redusã a electronului şi golului,pe care în cazul excitonilor am notat-o cu m.Densitatea de fotoni se poate calcula din expresia

$$\rho(\hbar\omega)d(\hbar\omega) = N(\kappa)d\kappa = \frac{2}{(2\pi)^3}4\pi\kappa^2 d\kappa$$

unde $\kappa = n(\omega / c) = n(\hbar\omega / \hbar c)$. Factorul 2 apare deoarece existã douã stări de polarizare.

$$\frac{d\kappa}{d(\hbar\omega)} = \frac{1}{\hbar c}(n + \frac{dn}{d\omega}) = \frac{\bar{n}}{\hbar c}$$

unde n este indicele de refracţie de fazã iar $\bar{n}$ este indicele de refracţie de grup. Se obţine

$$\rho(\hbar\omega) = \frac{1}{\pi^2}(\frac{n\hbar\omega}{\hbar c})^2\frac{\bar{n}}{\hbar c} = \frac{1}{\pi^2}\frac{n^2\bar{n}}{(\hbar c)^3}(\hbar\omega)^2 \qquad (6.5)$$

Regulile de selecţie ale tranziţiilor corelate cu elementul de matrice $|e_o \cdot p_{cv}|^2$ vor fi discutate în paragraful 3.8. Emisia spontanã totalã,integratã pe toate energiile fotonilor, este egalã cu rata de recombinare radiantã totala a purtatorulor de sarcinã care,multiplicatã cu sarcina q a electronului,ne dã componenta radiantã a densitãţii de volum a curentului electric, necesar pentru a menţine o anumitã separare a cuasinivelelor Fermi pentru electroni şi goluri,

$$j_r = q\int R_{sp}(\hbar\omega)d(\hbar\omega)$$

Aceastã densitate de curent se exprimã în mod uzual în kA/mm.cm^2. Pentru a obţine densitatea de curent pe unitatea de suprafaţã într-un laser,se multiplicã expresia de mai sus cu grosimea lãrgimii active sau cu lãrgimea vãii cuantice de potenţial în cazul când aceasta reprezintã regiunea activã. Pentru a obţine curentul de prag într-un laser la expresia de mai sus se adaugã curentul de recombinare Auger şi curentul de scurgere.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

3.7. *Amplificarea radiației*

Presupune cã un flux Φ de fotoni se propagã în diecția x. Creșterea netã a fluxului de fotoni pe unitatea de lungime în aceastã direcție este datã de expresia

$$\frac{d\Phi}{dx} = W_{cv} - W_{vc}$$

unde W_{cv} reprezintã rata de emisie stimulatã datã de expresia (2.6)

$$W_{cv} = \frac{1}{\hbar\omega}\frac{\pi q^2 \hbar N}{\varepsilon m^2}|\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2 |< F_v|F_c >|^2 g(E_{cv} - E_g) f_c (1 - f_v) \qquad (7.1)$$

iar W_{vc} reprezintã rata de absorbție (2.5a)

$$W_{vc} = \frac{1}{\hbar\omega}\frac{\pi q^2 \hbar N}{\varepsilon m^2}|\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{vc}|^2 |< F_c|F_v >|^2 g(E_{cv} - E_g) f_v (1 - f_c) \qquad (7.2)$$

Fluxul de fotoni

$$\Phi(\omega) = Nv = \frac{Nc}{\bar{n}} \qquad (7.3)$$

Viteza de grup a undei este caracterizatã de indicele de refracție de grup $\bar{n}$ care este definit de relația

$$\bar{n} = n_{ef} + \omega\frac{dn_{ef}}{d\omega} \qquad (7.4)$$

unde n_{ef} este indicele de refracție efectiv (indicele de refracție al vitezei de fazã) pentru modul din ghidul de undã. Dacã modurile de undã sunt neghidate atunci n_{ef}=n, indicele de refracție din cristal.Al doilea termen din membrul drept al relației (7.4) include atât dispersia ghidului de undã cât și dispersia materialului. Se definește amplificarea sau câstigul optic, g, creșterea fracționarã a numarului de fotoni pe unitatea de lungime activã

$$g \equiv \frac{1}{\Phi}\frac{d\Phi}{dx} = \frac{W_{cv} - W_{vc}}{\Phi} \qquad (7.5)$$

Având în vedere expresiile (7.1),(7.2) si (7.3) se obține

$$g(\hbar\omega) = \frac{1}{\hbar\omega}\frac{\pi q^2 \hbar \bar{n}}{\varepsilon c m^2}|\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2 |< F_v|F_c >|^2 g(E_{cv} - E_g)(f_c - f_v) \qquad (7.6)$$

In valea cuanticã de potențial trebuie sã sumãm pe toate perechile de tranziții intersubbenzi. Notãm $g(\hbar\omega, n_c, n_v)$ amplificarea pentru tranzitia între subbanda de conducție

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

cu numărul cuantic n_c și subbanda de valență cu numărul cuantic n_v. Amplificarea totală este dată de expresia

$$g(\hbar\omega) = \sum_{n_c} \sum_{n_v} g(\hbar\omega, n_c, n_v)$$

Din relația (7.6) rezultă că există amplificare a radiației electromagnetice atunci când $f_c(E)>f_v(E')$. Această inegalitate

$$\frac{1}{e^{(E_i-E_{Fn})/kT}+1} > \frac{1}{e^{(E_i'-E_{Fp})/kT}+1}; \qquad E_i - E_{Fn} < E_i' - E_{Fp}$$

este echivalentă cu inegalitatea

$$E_g < \hbar\omega < E_{Fn} - E_{Fp} \tag{7.7}$$

$$E_i - E_i' = E_c + \frac{\hbar^2k^2}{2m_c} - E_v + \frac{\hbar^2k^2}{2m_v} = E_g + \frac{\hbar^2k^2}{2m_r} \equiv \hbar\omega$$

unde E_{Fn} este cuasinivelul Fermi pentru electroni iar E_{Fp} este cuasinivelul Fermi pentru goluri. Prin urmare, pentru a se obține amplificarea radiației este necesar ca separarea cuasinivelelor Fermi să fie mai mare decât lărgimea benzii interzise. La echilibru, $E_{Fn}=E_{Fp}$ și nu se obține amplificare. De asemenea, dacă concentrația electronilor este mică atunci $f_c\approx 0$ si $f_c-f_v\approx -1$ și prin urmare nu se obține amplificare ci absorbție puternică dacă energia fotonilor este mai mare decât E_g. Atunci când $f_c-f_v\approx 0$, la concentrații mari ale electronilor atât în banda de conducție cât și în banda de valență, la echilibru, materialul este transparent. Pentru a se obține amplificare mare este necesar să realizăm condiția de neechilibru cu concentrații mari atât de electroni, $f_c\approx 1$ cât și de goluri, $f_v<0,5$. Pentru a genera concentrații mari de neechilibru de electroni și de goluri se utilizează în general pompajul optic sau injecția electrică în joncțiunea p-n polarizată direct.In acest caz se separă cuasinivelele Fermi și dacă această separare ste astfel încât $E_{Fn}-E_{Fp}=E_g$, materialul este transparent pentru energia fotonilor $\hbar\omega=E_g$,în acord cu relația (7.7). Concentrațiile electronilor și golurilor din banda de conducție și, respectiv, de valență, la care se obține această separare se numesc concentrații de transparență.. Concentrația purtătorilor de sarcină liberi într-o bandă pentru o anumită poziție a nivelului Fermi se găsește integrând pe lărgimea întregii benzii permise produsul dintre densitatea de stări de energie și probabilitatea de ocupare a acestora cu purtători

$$n = 2\int_{E_c}^{\infty} g(E-E_c) f_c dE; \qquad p = 2\int_{-\infty}^{E_v} g(E_v - E')dE' \tag{7.8}$$

Densitatea de stări în funcție de energie este prezentată în paragraful 2.2. In valea cuantică de potențial $g_{2D}(E)$ este independentă de energie și integrala poate fi evaluată analitic. Pentru subbenzi parabolice, cum sunt cele ale unei văi de potențial din banda de conducție, concentrația electronilor este dată de expresia

$$n = \frac{m_c kT}{\pi\hbar^2 L}\sum_i \ln\{1+\exp[-(E_{ci}-E_{Fn})/kT]\} \tag{7.9}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Sumarea se face pe toate subbenzile cuantificate din valea cuanticã iar E_{ci} sunt nivelele cuantice. Relaţia (7.9) nu este valabilã pentru banda de valenţã deoarece în acest caz structura subbenzilor nu este parabolicã , $g_{2D}(E)$ fiind o funcţie complicatã, cu maxime locale. In acest caz concentraţia golurilor se gãseşte efectuând calculul numeric în spaţiul k deoarece stãrile k sunt totdeauna uniform distribuite în spaţiul k, independent de cât de complicate sunt benzile de energie. In acest caz se scrie

$$p = 2\sum_{j}\int_{0}^{k_{max}} g_{2D}(k_t)\{1 - f_v(E_{vj})\}dk_t \qquad (7.10)$$

Sumarea se face pe toate subbenzile cuantificate $E_{vj}(k_t)$ din valea cuanticã din banda de valenţã, atât pentru banda golurilor grele cât şi pentru banda golurilor uşoare. k_t reprezintã componenta vectorului de undã din planul vãii cuantice (planul paralel cu stratul subţire) iar k_{max} reprezintã o limitã numericã peste care contribuţia la integralã poate fi neglijatã. Amplificarea opticã se realizeazã atunci când concentraţia purtãtorilor injectaţi este mai mare decât concentraţia de transparenţã, astfel cã cuasinivelele Fermi sunt separate printr-un interval mai mare decât lãrgimea benzii interzise. Rata cu care creşte amplificarea cu creşterea concentraţiei purtãtorilor injectaţi se noteazã cu dg/dN şi se numeşte amplificare diferenţialã. Notãm deosebirea de semnificaţie a lui g=câştig sau amplificare şi g_{2D}=densitatea de stãri de energie. Amplificarea diferenţialã este mare atunci când structura de benzi de energie este simetricã (m_c=m_v) şi când marginea benzii este abruptã. Atunci când suntem interesaţi ca materialul sã fie transparent la radiaţie, pentru a avea concentraţia de transparenţã, a purtãtorilor ,cât mai micã sunt necesare trei condiţii: structura de benzi simetricã (m_c=m_v) la fel ca în cazul amplificãrii, marginea benzii neabruptã (invers decât în cazul amplificãrii) şi în plus, densitate micã de stãri. Existã o lãrgime spectralã a fiecãrei tranziţii: fotonii incidenţi, de energie hν, nu vor produce numai tranziţii la E_{cv}=hν ci o serie de tranziţii distribuite pe un interval de energie ΔE,a dicã la E_{cv}=hν+ΔE. Acest efect apare deoarece un electron în banda de conducţie nu rãmâne permanent într-o stare fixã ci, datoritã coliziunilor, de exemplu cu fononii sau alţi electroni el trece din timp în timp dintr-o stare în altã stare. Timpul cât el stã pe o stare este t~0,1 ps (timpul de relaxare). Funcţia de formã a liniei de emisie este de formã Lorentzianã şi este datã de expresia

$$L(E_{cv}) = \frac{1}{\pi}\frac{\hbar/\tau}{(E_{cv} - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau)^2}$$

Amplificarea se scrie în acest caz

$$G(\hbar\omega) = \int g(\hbar\omega)L(E_{cv})dE_{cv}$$

unde g(ħ w) este dat de expresia (7.6).

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

3.8. *Elementul de matrice al tranziției optice. Reguli de selecție*

In cele ce urmează vom utiliza notația

$$|H'_{cv}|^2 = (\frac{q|A_o|}{2m})^2 |M_T|^2$$

unde

$$|M_T|^2 \equiv |< u_v|\mathbf{e}_o \cdot \hat{\mathbf{p}}|u_c >|^2 |< F_v|F_c >|^2 \qquad (8.1)$$

De asemenea am notat

$$|< u_v|\mathbf{e}_o \cdot \hat{\mathbf{p}}|u_c >|^2 \equiv |\mathbf{e}_o \cdot \mathbf{p}_{vc}|^2$$

Ne vom referi în continuare la $|M_T|^2$ ca element de matrice al tranziției. Regulile de selecție ale tranzitiilor optice sunt corelate cu integrala ce conține funcțiile anvelopă precum și cu integrala ce conține funcțiile Bloch. Referitor la integrala ce conține funcțiile anvelopă F_c și F_v menționăm următoarele: (a) In valea cuantică de adâncime infinită funcțiile proprii F_c și F_v sunt independente de masele efective ale electronului și golului. (b) Aceste funcții proprii formează un set de funcții ortogonale. Atunci când numerele cuantice ale subbenzilor din banda de conducție și, respectiv, de valență între care are loc tranziția sunt egale între ele, $n_c=n_v$, funcțiile anvelopă sunt identice și $|<F_v|F_c>|^2=1$. Aceste tranziții sunt permise. Atunci când n_c este diferit de n_v se obține $|<F_v|F_c>|^2=0$. aceste tranziții sunt interzise. In cazul văii de potențial cu bariere finite penetrația funcției de undă în barieră depinde de masa particulei și pentru n_c diferit de n_v condiția de ortogonalitate între funcțiile de undă ale electronilor și golurilor este satisfacută numai aproximativ astfel că și în acest caz sunt posibile tranziții însă foarte slabe în comparație cu tranzițiile permise (la $n_c=n_v$).

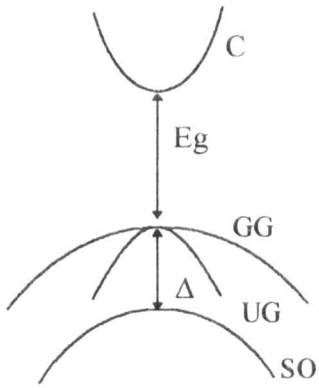


Fig. 3.6

Pentru a stabili regulile de selecție corelate cu integrala dupa funcțiile Bloch (cu elementul de matrice al impulsului) considerăm structura de benzi de energie reprezentată în Fig.3.6. Banda de conducție este notată cu C.Pentru banda de valență am utilizat notațiile: GG-banda golurilor grele, UG-banda golurilor ușoare, SO-banda separată de celelalte două, cu valoarea Δ, datorită interacțiunii spin-orbită. Benzile de energie provin din nivelele discrete ale atomilor care compun cristalul. Banda de conducție provine din orbitalii atomici s iar cele trei benzi de valență provin din orbitalii atomici p (p_x,p_y,p_z). Notăm funcțiile Bloch cores-punzătoare acestor orbitali cu u_s și respectiv u_x,u_y,u_z. Funcțiile Bloch păstrează multe dintre proprietățile de simetrie ale orbitalilor atomici. Funcția de undă Bloch u_s din banda de conducție are simetrie pară în toate cele trei direcții din celula unitate,

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

în mod analog cu simetria sferică a orbitalului s. De asemenea u_z are simetrie impară de-a lungul axei z și simetrie pară de-a lungul celorlalte axe din celula unitate, la fel ca orbitalul p_z. Din aceste două observații rezultă că simetria impară de-a lungul axei z implică relația $<u_s|u_z>=0$. Insă acțiunea operatorului impuls p_z asupra funcției u_z inversează simetria acesteia de-a lungul axei z astfel că elementul de matrice al impulsului $<u_s|p_z|u_z>$ este în general diferit de zero. Pe baza acestor argumente și a altora similare se stabilesc următoarele relații

$$
\begin{aligned}
&< u_s|p_i|u_j >= 0; \qquad i \neq j \\
&< u_s|\hat{\mathbf{p}}|u_i >=< u_s|p_i|u_i >\equiv M \\
&< u_s|\hat{\mathbf{p}}|\bar{u}_i >= 0
\end{aligned}
\tag{8.2}
$$

unde i=x,y,z iar cu u_i si $\bar{u}_i$ am notat funcțiile de undă cu spin sus și, respectiv, spin jos. Cea de a treia relație este determinată de faptul că funcțiile Bloch de spin opus nu interacționează între ele. M reprezintă elementul de matrice al impulsului între funcțiile Bloch de bază: u_s și u_x,u_y,u_z. Funcțiile Bloch din banda de valență u_g,u_u și u_{SO} corespunzătoare celor trei benzi reprezentate în Fig.3.6 pot fi scrise ca o combinație liniară a celor trei funcții de bază u_x,u_y,u_z. Considerăm vectorul de undă **k** al electronului orientat de-a lungul axei z și având în vedere că există degenerare de spin în toate cele trei benzi, funcțiile de undă Bloch sunt de forma

$$
\begin{aligned}
&u_g = -\frac{1}{\sqrt{2}}(u_x + iu_y); && \bar{u}_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{u}_x - i\bar{u}_y) \\
&u_u = -\frac{1}{\sqrt{6}}(\bar{u}_x + i\bar{u}_y - 2u_z); && \bar{u}_u = \frac{1}{\sqrt{6}}(u_x - iu_y + 2\bar{u}_z) \\
&u_{SO} = -\frac{1}{\sqrt{3}}(\bar{u}_x + i\bar{u}_y + u_z); && \bar{u}_{SO} = \frac{1}{\sqrt{3}}(u_x - iu_y - \bar{u}_z)
\end{aligned}
\tag{8.3}
$$

Factorii numerici reprezintă constante de normare [7]. Atunci când **k** este orientat într-o altă direcție se redefinesc aceste relații. In cele ce urmează vom stabili o relație între $|M_T|^2$ și $|M|^2$.Am definit pe $|M_T|^2$ între $u_c(=u_s)$ și funcțiile Bloch u_v din banda de valență (u_g,u_u,u_{SO}) iar pe $|M|^2$ între u_s și funcțiile Bloch u_i de bază (u_x,u_y,u_z). Exprimând pe u_v în funcție de u_i în acord cu relațiile (8.3) găsim relațiile între $|M_T|^2$ și $|M|^2$.Intre banda de conducție și banda de valență există patru tranziții posibile (Fig.3.7): $u_c \rightarrow u_v; \bar{u}_c \rightarrow u_v$; $\bar{u}_c \rightarrow \bar{u}_v; u_c \rightarrow \bar{u}_v$. Considerând integrala pe funcțiile anvelopă egală cu unitatea și sumând peste toate cele patru tipuri de tranziții, ec.(8.1) devine

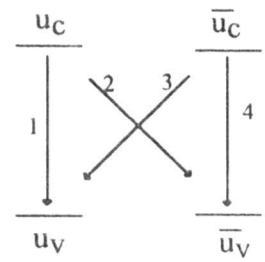
$$
|M_T|^2 = \sum_{u_c,\bar{u}_c} \sum_{u_v,\bar{u}_v} |< u_v|\mathbf{e}_o.\hat{\mathbf{p}}|u_c >|^2 \tag{8.4}
$$

Scriem $\mathbf{e}_o.\mathbf{p}=e_{ox}p_x+e_{oy}p_y+e_{oz}p_z$. Având în vedere (8.3) și regulile de selecție (8.2) obținem pentru tranzițiile din banda de conducție către cele trei subbenzi de valență următoarele valori ale lui $|M_T|^2$

$$
\begin{aligned}
&|M_T|_g^2 = \frac{1}{2}|M|^2[|-e_{ox} - ie_{oy}|^2 + 0 + \quad 0 + \quad |e_{ox} - ie_{oy}|^2] \\
&|M_T|_u^2 = \frac{1}{6}|M|^2[|2e_{oz}|^2 + |e_{ox} - ie_{oy}|^2 + |-e_{ox} - ie_{oy}|^2 + |2e_{0z}|^2] \\
&|M_T|_{SO}^2 = \frac{1}{3}|M|^2[|-e_{oz}|^2 + |e_{ox} - ie_{oy}|^2 + |-e_{ox} - ie_{oy}|^2 + |-e_{oz}|^2]
\end{aligned}
\tag{8.5}
$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Fiecare termen din interiorul parantezelor drepte corespunde la una din cele patru tranziţii numerotate de la stânga la dreapta în ordinea arătată pe Fig.3.7. Relaţiile (8.5) pot fi scrise într-o formă mai simplă .Substituim $e_{ox}^2+e_{oy}^2$ cu $1-e_{oz}^2$ și considerând vectorul de undă **k** al electronului orientat de-a lungul axei z,scriem $e_{oz}=\hat{\mathbf{k}}.\mathbf{e}_o$ unde $\hat{\mathbf{k}}$ este versorul lui **k**.Cu aceste notaţii se poate scrie



Fig, 3.7.

$$|M_T|_g^2 = |M|^2(e_{ox}^2 + e_{oy}^2) = |M|^2(1 - |\hat{\mathbf{k}}.\mathbf{e}_o|^2)$$

$$|M_T|_u^2 = \frac{1}{3}|M|^2(e_{ox}^2 + e_{oy}^2 + 4e_{oz}^2) = |M|^2(\frac{1}{3} + |\hat{\mathbf{k}}.\mathbf{e}_o|^2) \qquad (8.6)$$

$$|M_T|_{SO}^2 = \frac{2}{3}|M|^2(e_{ox}^2 + e_{oy}^2 + e_{oz}^2) = \frac{2}{3}|M|^2$$

Pentru evaluarea lui $|M|^2$ se utilizează relaţia dintre acest element de matrice și masa efectivă, mărime ce poate fi măsurată experimental cu mare precizie utilizând metoda rezonanţei ciclotronice. In aproximaţia perturbaţiilor de ordinul doi (metoda **k.p**) masa efectivă a electronilor din banda de conducţie, de vector de undă **k** pe care l-am considerat orientat în direcţia axei z, este dată de expresia

$$\frac{1}{m_{cz}} = \frac{1}{m}[1 + \sum_{n \neq c} \frac{2}{m} \frac{|< u_c|p_z|u_n >|^2}{E_c - E_n}] \qquad (8.7)$$

unde sumarea se face pe toate benzile de energie n din cristal (a nu se confunda n cu numărul cuantic din valea cuantică de potenţial).E_n și E_c reprezintă marginile benzilor de energie. Se observă că în cristal la masa electronului liber, notată cu m, își aduce contribuţie interacţia dintre banda de conducţie și toate celelalte benzi din cristal,electronul fiind caracterizat printr-o masă efectivă. Semnul numitorului arată că benzile cu energie mai mare fac ca masa efectivă a electronului să devină mai mare de cât cea a electronului liber iar benzile cu energie mai mică micșorează masa efectivă. De asemenea, contribuţie semnificativă la sumă aduc benzile mai apropiate de banda de conducţie. Luând în considerare numai interacţia dintre banda de conducţie și cele trei subbenzi de valenţă și având în vedere relaţiile (8.3) si (8.2) se obţine

$$\frac{1}{m_c} = \frac{1}{m}\{1 + \frac{2|M|^2}{m}[\frac{2}{3}\frac{1}{E_g} + \frac{1}{3}\frac{1}{E_g + \Delta}] \qquad (8.8)$$

Subbanda golurilor grele nu aduce contribuţie deoarece funcţia Bloch a golurilor grele nu conţine u_z astfel că contribuţia la sumă este egală cu zero. Se sumează numai după subbanda golurilor ușoare si după subbanda separată datorită despicării spin-orbită.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

energetice sunt cele notate pe Fig.3.6. Din ec.(8.8) se obţine valoarea lui $|M|^2$ în funcţie de masa efectivã,

$$|M|^2 = (\frac{m_c}{m} - 1)\frac{E_g + \Delta}{2(E_g + \frac{2}{3}\Delta)} mE_g \qquad (8.9)$$

Evaluarea lui $|M|^2$ din aceastã relaţie se face cu o eroare de 26% deoarece nu am luat în considerare şi contribuţiile celorlalte benzi de energie.Calcule mai exacte ale lui $|M|^2$ conduc la rezultatele prezentate în Tabela 3.1 pentru câteva materiale [8].

Tabela 3.1

Materialul	$\frac{2\|M\|^2}{m}$, eV
GaAs	28,8±0,15
$Al_xGa_{1-x}As$ (x<0,3)	29,83±2,85x
$In_xGa_{1-x}As$	28,8-6,6x
InP	19,7±0,6
$In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ (x=0,47y) ă	19,7+5,6y

3.9. *Efectele dependente de polarizarea luminii*

Relaţiile (8.6) aratã cã valoarea elementului de matrice al tranziţiei optice depinde de unghiul dintre vectorul de undã **k** al electronului şi polarizarea câmpului electric al radiaţiei $\mathbf{e}_o$. In semiconductorul masiv (cazul tridimensional) fotonii de o anumitã polarizare interacţioneazã cu un numar mare de electroni având vectorii de undã **k** orientaţi în diverse direcţii.Media produsului $|\hat{\mathbf{k}}.\mathbf{e}_0|^2$ pentru toate valorile lui **k** din spaţiul tridimensional este egalã cu 1/3.Astfel pentru tranziţiile din banda de conducţie în toate cele trei subbenzi de valenţã pãtratul elementului de matrice al tranziţiei $|M_T|^2$ este egal cu $(2/3)|M|^2$ pentru orice polarizare a câmpului electric.Factorul 2 apare datoritã degenerãrii de spin.Valoarea medie a pãtratului elementului de matrice al tranziţiei de-a lungul a trei direcţii ortogonale de polarizare $\mathbf{e}_{ox}, \mathbf{e}_{oy}, \mathbf{e}_{oz}$ se evaluezã simplu substituind în ec.(8.6) pe $\hat{\mathbf{k}}$ cu o direcţie medie $\hat{\mathbf{k}}_m$ a vectorului de undã $\mathbf{k}.\hat{\mathbf{k}}_m$ se obţine prin gãsirea direcţiei medii a tuturor vectorilor permişi **k** din primul octant al sistemului de coordonate (dacã am include toţi octanţii în mediere am obţine $\mathbf{k}_m = 0$ .Pentru semiconductorul masiv ,

$$\hat{\mathbf{k}}_m = \frac{1}{3}(\hat{\mathbf{k}}_x + \hat{\mathbf{k}}_y + \hat{\mathbf{k}}_z) \qquad (9.1)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Substituind această valoare a lui $\hat{\mathbf{k}}_m$ in (8.6) se obţine pentru fiecare direcţie de polarizare ($\mathbf{e}_{ox}$,$\mathbf{e}_{oy}$,$\mathbf{e}_{oz}$) valoarea $|M_T|^2=(2/3)|M|^2$ pentru toate benzile.Evident că,aşa cum rezultă din (8.6), tranziţia din banda de conducţie în banda de valenţă SO nu depinde de polarizarea radiaţiei. In structurile cuantice, în apropierea marginii benzii, vectorul de undă **k** este cuantificat de-a lungul anumitor direcţii.In valea cuantică de potenţial toţi vectorii de undă **k** sunt orientaţi de-a lungul aceleiaşi axe. Prin urmare, în acest caz

$$\hat{\mathbf{k}}_m = \hat{\mathbf{k}}_z \tag{9.2}$$

deoarece am considerat **k** orientat de-a lungul axei z pe care o considerăm orientată în direcţia lărgimii văii cuantice, aşa cum am considerat şi în paragraful precedent. In acest caz, substituind (9.2) in (8.6) se obţin următoarele rezultate. Pentru tranziţia din subbanda de conducţie în subbanda golurilor grele

$|M_T|^2=0$,pentru polarizarea luminii pe direcţia z

$|M_T|^2=|M|^2$,pentru polarizarea luminii pe direcţiile x şi y (9.3)

Pentru tranziţia din banda de conducţie în banda golurilor uşoare

$$\begin{aligned} |M_T|^2 &= \frac{4}{3}|M|^2; \quad \text{pentru } \mathbf{e}_{oz} \\ |M_T|^2 &= \frac{1}{3}|M|^2; \quad \text{pentru } \mathbf{e}_{ox}, \mathbf{e}_{oy} \end{aligned} \tag{9.4}$$

Pentru un fir cuantic în care $L_x=L_z$

$$\hat{\mathbf{k}}_m = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{k}}_x + \hat{\mathbf{k}}_z) \tag{9.5}$$

Se obţin următoarele rezultate

$$\frac{|M_T|^2}{|M|^2} = \begin{cases} \frac{1}{2}, \text{pentru} & \mathbf{e}_{ox} \\ \frac{1}{2}, \text{pentru} & \mathbf{e}_{oz} \\ 1, \text{pentru} & \mathbf{e}_{oy} \end{cases} \tag{9.6}$$

în cazul tranziţiilor din banda de conducţie în subbanda golurilor grele şi

$$\frac{|M_T|^2}{|M|^2} = \begin{cases} \frac{5}{6}, \text{pentru} & \mathbf{e}_{ox}, \mathbf{e}_{oz} \\ \frac{1}{3}, \text{pentru} & \mathbf{e}_{oy} \end{cases} \tag{9.7}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

în cazul tranzţiilor din banda de conducţie în banda golurilor uşoare. Pentru un fir cuantic în care $L_x=2L_z$ (notăm că se consideră lungimea firului pe direcţia y).

$$\hat{\mathbf{k}}_m = \frac{1}{\sqrt{5}}(\hat{\mathbf{k}}_x + 2\mathbf{k}_z) \tag{9.8}$$

se obţin rezultatele

$$\frac{|M_T|^2}{|M|^2} = \begin{cases} \frac{4}{5}, \text{pentru} & \mathbf{e}_{ox} \\ \frac{1}{5}, \text{pentru} & \mathbf{e}_{0z} \\ 1, \text{pentru} & \mathbf{e}_{oy} \end{cases} \tag{9.9}$$

în cazul tranziţiilor din banda de conducţie în subbanda golurior grele şi

$$\frac{|M_T|^2}{|M|^2} = \begin{cases} \frac{8}{15}, \text{pentru} & \mathbf{e}_{ox} \\ \frac{17}{15}, \text{pentru} & \mathbf{e}_{oz} \\ \frac{1}{3}, \text{pentru} & \mathbf{e}_{oy} \end{cases} \tag{9.10}$$

în cazul tranziţiilor din banda de conducţie în subbanda de valenţă a golurilor uşoare. Se observă că pentru fiecare tip de tranziţie suma pătratelor elementelor de matrice pe toate cele trei direcţii de polarizare este egală cu $2|M|^2$ în toate cazurile: 3D, 2D, 1D. Prin urmare, intensitatea totală a tranziţiilor se conservă.In structurile cuantice, spre deosebire de semiconductorul masiv, are loc o redistribuire a intensităţii tranziţiilor de-a lungul celor trei direcţii de polarizare datorită distribuţiei neuniforme a direcţiei vectorului **k**. Pentru polarizări arbitrare, efectuăm descompunerea câmpului pe trei direcţii arbitrare şi elementul de matrice al tranziţiei este dat de suma trigonometrică a celor trei componente

$$|M_T|^2 = |M|^2 \sum_i \mathbf{e}_{oi}^2 S_i; \quad i = x, y, z \tag{9.11}$$

unde

$$S_i = \frac{|M_T|^2}{|M|^2}$$

este determinat de relaţiile de mai sus (9.3)-(9.10). Considerăm un fir cuantic şi notăm cu q unghiul dintre axa firului şi polarizarea $\mathbf{e}_o$. Utilizând relatia (9.11) şi relaţiile (9.6), (9.7) se poate scrie

$$\frac{|M_T|_u^2}{|M_T|_g^2} = \frac{\frac{1}{3}\cos^2\theta + \frac{5}{6}\sin^2\theta}{\cos^2\theta + \frac{1}{2}\sin^2\theta} \tag{9.12}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

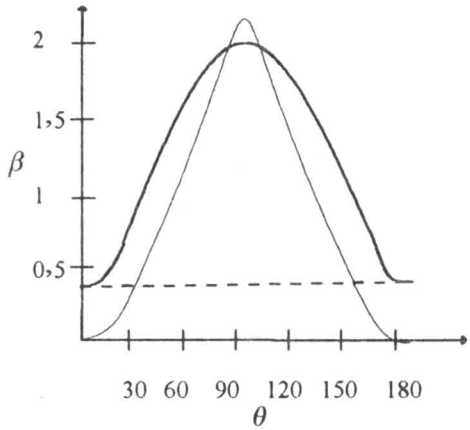


Fig. 3.8

Raportul dintre elementele de matrice ale tranziției în banda golurior ușoare și, respectiv, în banda golurilor grele, în funcție de unghiul θ este reprezentată în Fig. 3.8 așa cum rezultă din ec. (9.12). Firul cuantic are $L_x=L_y$ =10 nm și este construit din GaAs/AlAs. Pe Fig.3.8 este reprezentată cu linie întreruptă aceeași funcție folosind o metodă de calcul mai complicată [8]. Linia punctată reprezintă $\beta=f(\theta)$ pentru valea cuantică de potențial. Deoarece în acest caz câmpul electric rămâne în planul văii de potențial, pentru toate unghiurile β este independent de polarizare. Toate aceste rezultate obținute mai sus se referă la stările electronice din apropierea marginii benzii, unde vectorul de undă **k** are numai componente cuantificate. Pentru energia electronului mai mare decât marginea benzii vectorul de undă **k** se înclină față de axa (axele) de confinare și elementul de matrice al tranziției se modifică. Menționăm că în valea cuantică există o singură axă de confinare (notată z în acest paragraf) iar în firul cuantic există două axe de confinare (x și z). De asemenea, la energii depărtate de marginea benzii apare o mixare a subbenzilor de valență și este indicat ca ec. (8.4) să se calculeze numeric.

3.10. *Efecte neliniare și electrooptice*

Efectele neliniare și electrooptice sunt corelate cu modificarea constantelor optice ale materialelor de către câmpul optic de intensitate mare și, respectiv, de către câmpul electric continuu. Această modificare este corelată cu răspunsul dielectric al ionilor și electronilor. In semiconductori joacă rol principal răspunsul dielectric al electronilor din benzile de valență și de conducție și, prin urmare, tranzițiile acestora dintr-o bandă în alta. Văile cuantice de potențial au proprietăți optice neliniare și electrooptice deosebite datorită următoarelor caracteristici: (a) Creșterea intensității interacțiunii radiației cu materia datorită efectelor excitonice. (b) Spațiul de fază accesibil restrâns, ceea ce determină umplerea benzilor de energie cu electroni la densități mai mici ale acestora decât în semiconductorul masiv și în consecință micșorarea curentului de prag în laseri. (c) Confinarea funcției de undă a electronilor, ceea ce determină un efect Stark, indus de către câmpul electric, intens. In cele ce urmează ne vom referi la ultimele două consecințe și la aplicațiile acestora.

3.10.1. *Efecte optice neliniare*

Vom discuta mai întâi efectele optice neliniare în materialul masiv (3D). Dacă intensitatea radiației incidentă pe material este slabă atunci între câmpul electric **F** al undei și polarizarea **P** a unui dielectric există o relație liniară

$$\mathbf{P}=\chi\mathbf{F} \qquad (10.1)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde susceptibilitatea χ este corelatã cu permitivitatea relativã ε_r prin relaţia

$$\chi=\varepsilon_o(\varepsilon_r-1) \tag{10.2}$$

unde ε_o este permitivitatea vidului. La intensitãţi mari ale radiaţiei existã o relaţie neliniara intre **P** si **F**

$$P_i = \sum_k \chi_{ik}F_k + \sum_{kl} \chi_{ikl}F_kF_l + \sum_{klm} \chi_{klm}F_kF_lF_m \tag{10.3}$$

Pentru o intensitate a radiaţiei de 10^9W/cm^2 câmpul electric al undei are amplitudinea $F_o=10^6$V/cm. Intensitatea radiaţiei solare la suprafaţa Pãmântului este de 0,135 W/cm^2 (în condiţii AMO, în afara atmosferei terestre) ceea ce corespunde unui câmp electric al undei F_o=10 V/cm.O radiaţie laser de putere 10^8W, focalizatã pe o suprafaţã de 100 mm^2 dã un câmp $F_o=10^8$V/cm, valoare la care este distrus orice corp solid. In dielectrici şi semiconductori cea mai mare cvontribuţie la χ (şi la efectele neliniare) o aduc electronii legaţi. In plus în semiconductori aduc o contribuţie la nelinearitate şi purtãtorii de sarcinã liberi. Din punct de vedere clasic neliniaritatea este determinatã de anarmonicitatea oscilatiior electronilor legaţi, în câmp electric alternativ. Ecuaţia de mişcare unidimensionalã a unui oscilator este

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega_o^2 x - \gamma x^3 = (\frac{q}{m})F_o \cos\omega t \tag{10.4}$$

unde coeficientul g al termenului neliniar se considerã cã are valoare micã. Pentru simplitate am neglijat termenul de atenuare. Ecuaţia (10.4) are soluţia $x=x_o\cos\omega t$. Substituind aceastã valoare a lui x în ec. (10.4) se obţine

$$\frac{3}{4}\gamma x_o^3 + (\omega^2 - \omega_o^2)x_o + \frac{q}{m}F_o = 0 \tag{10.5}$$

unde am neglijat termenul $-(1/4)gx_o^3\cos3\omega t$ şi am ţinut cont de identitatea $4\cos^3\omega t=\cos3\omega t+3\cos\omega t$. Eliminând F_o din (10.4) si (10.5) se obţine ecuaţia

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x_o \cos\omega t - \frac{1}{4}\gamma x_o^3 \cos 3\omega t = 0 \tag{10.6}$$

Solutia acestei ecuaţii este neliniarã şi este de forma

$$x = x_o \cos\omega t - \frac{\gamma x_o^3}{36\omega^2}\cos 3\omega t \tag{10.7}$$

Momentul de dipol,~qx,are frecvenţele ω si 3ω. Polarizarea P este momentul de dipol pe unitatea de volum. Din (10.7) rezultã cã se generează armonica a treia (3ω) care este descrisã de cãtre al treilea termen din membrul drept al ec.(10.3). Armonica a doua este generatã de cãtre un termen proporţional cu x^2 în ecuaţia de mişcare (noi nu l-am inclus în ecuaţie) şi deci de termenul al doilea din ec.(10.3). O forţã de restabilire (revenire) proporţionalã cu x^2 implicã un potenţial V proporţional cu x^3 şi deci $V(x)\neq V(-x)$. Prin

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

urmare, dielectricul în care se generează armonica a doua nu posedă simetrie de inversie și deci nu poate fi decât un piezoelectric sau un feroelectric. Scriem ecuația (10.5) care dă dependența de frecvență w a amplitudinii oscilațiilor sub forma

$$\frac{1}{4}\frac{\gamma}{\omega_o^2}x_o^3 = [1-(\frac{\omega}{\omega_o})^2]x_o - \frac{qF_o}{m\omega_o^2} \qquad (10.8)$$

Dacă reprezentăm în funcție de x_o partea stângă a acestei ecuații este o parabolă de ordinul trei iar partea dreaptă este o dreaptă. Pentru valori mici ale lui ω aceste două curbe se intersectează în trei puncte și deci există trei valori posibile ale lui x_o; amplitudinea cea mai mică este cea stabilă. Pentru valori mari ale lui ω se obține o singură soluție (un singur punct de intersecție). In Fig. 3.9 se reprezintă pătratul amplitudinii, x_o^2, în funcție de frecvență. Curba prezintă o instabilitate la o frecvență ω_i care se obține din condiția $d\omega/d(x_o^2)=0$,

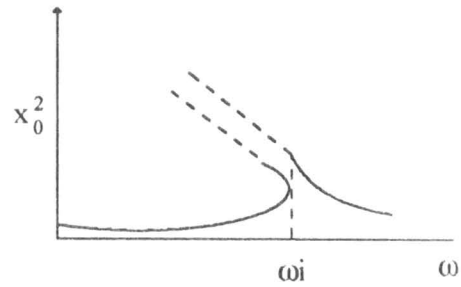


Fig. 3.9

$$\omega_i = \omega_o\sqrt{1-(\frac{3}{2})^{4/3}\gamma^{1/3}(qF_o/m\omega_o^3)^{2/3}} \approx \omega_o\{1-\frac{1}{2}(\frac{3}{2})^{4/3}\gamma^{1/3}(qF_o/m\omega_o^3)^{2/3}\} \qquad (10.9)$$

Menționăm ca dezvoltarea în serie (10.9) este valabilă cu condiția $gF_o^2 << (mw^3/q)^2$, ceea ce presupune că frecvența ω_i este numai cu o valoare mică mai mică decât frecvența de rezonanță ω_o. Datorită instabilității, rezultă că în vecinătatea lui $\omega=\omega_o$ (care este foarte apropiată de ω_i) crește generarea armonicelor multiple. Dacă asupra materialului se aplică un câmp electric ce conține două frecvențe de oscilație, de forma

$$F=F_1\exp[i\omega_1 t-i(\mathbf{k}_1.\mathbf{r})] + F_2\exp[i\omega_2 t- i(\mathbf{k}_2.\mathbf{r})] \qquad (10.10)$$

se generează frecvențele de bătăi , $2\omega_1-\omega_2$ si $2\omega_2-\omega_1$. Dacă $\omega_2=2\omega_1$, frecvențele bătăilor sunt zero și, respectiv $3\omega_1$. Când frecvența bătăilor este zero se obține așanumita redresare optică prin mixarea armonicelor. La lungimi de undă lungi, în ecuația (10.10) se pot neglija termenii ce conțin $\mathbf{k}_1.\mathbf{r}$ și $\mathbf{k}_2.\mathbf{r}$ cu excepția unei diferențe de fază ϕ astfel că în locul unei unde care se propagă avem doua câmpuri alternative

$$F(t)=F_1\cos(\omega t+\phi)+F_2\cos 2\omega t \qquad (10.11)$$

Aplicăm acest câmp unui semiconductor omogen izotrop. In domeniul purtătorilor fierbinți densitatea curentului electric este dată de expresia

$$j(t)=\sigma_o(F+\beta F^2) \qquad (10.12)$$

Relația este similară cu relația (10.3), P=f(F). Valoarea mediată dupa timp a lui j este proporțională cu acesta este un curent continuu și de aceea se vorbește de redresare optică. Principiul redresării optice pentru un câmp electric alternativ este reprezentat în

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

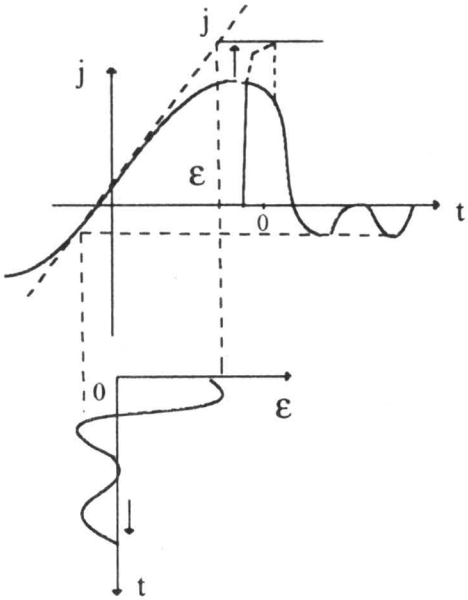


Fig. 3.10

Fig.3.10. Partea de jos din figurã reprezintã F(t) pentru $F_1=F_2$ si $\phi=0$. Media temporalã a lui F este zero în acest caz pentru orice valoare a lui ϕ. In partea dreaptã a figurii se reprezintã j(t) obţinut pentru caracteristica j(F) simetricã neliniarã. Elongaţia pozitivã a curentului este puternic diminuatã pe când elongaţia negativã nu este afectatã. Se obţine o valoare medie temporalã <j> diferitã de zero,

$$< j >= \frac{3}{4}\sigma_o \beta F_1^2 F_2 \cos 2\varphi$$

După ce am discutat efectul de redresare opticã, pentru unde care nu se propagã,ne vom referi din nou la unde electromagnetice care se propagã prin mediu, când termenii ce conţin **k.r** nu sunt neglijabili. Prin propagarea undelor ω_1 şi ω_2 printr-un mediu dielectric se generează unda de frecvenţã ω_3. Conservarea energiei conduce la relaţia

$$\omega_3=\omega_1+\omega_2$$

iar conservarea impulsului conduce la relaţia

$$\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2$$

Presupunând $\mathbf{k}_1$ şi $\mathbf{k}_2$ paraleli şi introducând indicele de refracţie $=c|\mathbf{k}_i|/\omega_i$ ambele ecuaţii sunt satsfăcute simultan dacã $n_1=n_2=n_3$. Desigur cã aceastã relaţie nu poate fi totdeauna îndeplinitã. Puterea generatã pe frecvenţa ω_3 este proporţionalã cu

$$P_3 \sim \frac{\sin(\kappa_1+\kappa_2-\kappa_3)x/2}{(\kappa_1+\kappa_2-\kappa_3)^2} \qquad (10.13)$$

Aceasta are valoarea maximã pentru

$$x = \frac{\pi}{|\kappa_1+\kappa_2-\kappa_3|} = \frac{1}{2\left|\frac{n_1}{\lambda_1}+\frac{n_2}{\lambda_2}+\frac{n_3}{\lambda_3}\right|} \qquad (10.14)$$

unde l_i (i=1,2,3) este lungimea de undã în vid. Atunci când $\omega_1=\omega_2=\omega$ şi $\omega_3=2\omega$, se generează frecvenţa dublã pentru

$$x = \frac{\lambda}{4|n_\omega - n_{2\omega}|}$$

care este mult mai mare decât l pentru $n_w \approx n_{2w}$, adicã la dispersie slabã. Pentru cristale de lungime datã de relaţia (10.14) se obţine eficienţã mare de conversie în cristale birefringente ,

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

în mod uzual cristale uniaxiale, dacă birefringenţa depăşeşte dispersia. Dacă direcţiile de propagare ale razelor luminoase fac un anumit unghi cu axele optice ,viteza undei ordinare de frecvenţă ω este egală cu viteza undei extraordinare de frecvenţă 2ω. Fundamentala şi armonica sunt polarizate în direcţii diferite. Ele se găsesc în fază (fazele sunt "acordate") pe o "lungime de coerenţă" de câţiva cm şi se obţine o eficienţă de conversie (a undei fundamentale în unda de frecvenţă dublă) de 100%. Dacă ω_2=0, adică se aplică un câmp electric continuu intens (în pulsuri) pe lângă câmpul electromagnetic de frecvenţă ω_1, atunci se obţine armonica a doua ($2\omega_1$) pentru un oscilator care satisface ecuaţia (10.4). Prin urmare se obţine armonica a doua chiar în sisteme ce au simetrie de inversie , dacă se aplică concomitent cu unda un câmp electric continuu intens.

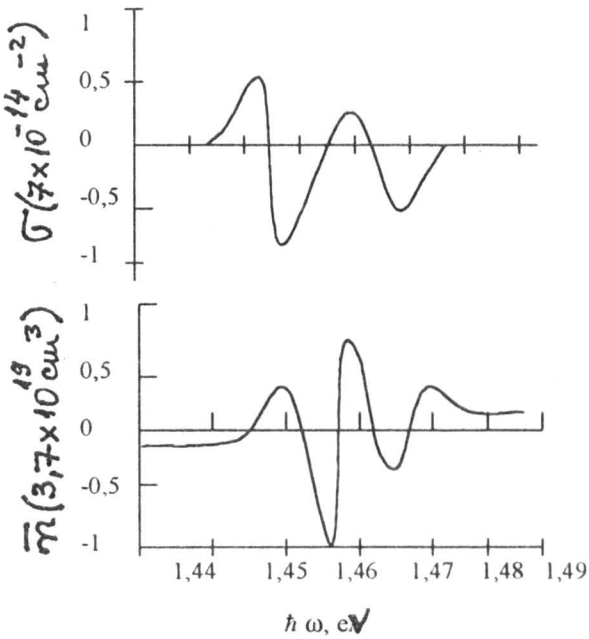


Fig. 3.11

Insă chiar la un câmp de 10^2V/cm aplicat pe un eşantion omogen din InAs de tip n ,la temperatura camerei, radiaţia de 10,6 mm obţinută de la un laser cu CO_2 în pulsuri (~10^5W/cm^2) este convertită în radiaţie de 5,6 mm. Puterea $P_{2\omega}$ este proporţională cu pătratul curentului continuu şi cu concentraţia electronilor din probă. Se obţin de asemenea frecvenţele bătăilor date de liniile l_1=10,6 mm si l_2=9,6 mm ale laserului cu CO_2 corespunzătoare frecvenţelor $\omega_3=2\omega_1-\omega_2$ şi $2\omega_2-\omega_1$ la 8,7 mm şi, respectiv, 11,8 mm. Un fenomen interesant ce apare în mediile optice neliniare este amplificarea parametrică. O radiaţie de frecvenţă ω_1 ce se propagă printr-un mediu neliniar este amplificată cu ajutorul unei radiaţii "de pompare" de frecvenţă ω_2 şi de amplitudine mare. Mediul fiind neliniar se obţine frecvenţa de mixare $\omega_3=\omega_1+\omega_2$. Frecvenţa ω_3 se compune la rândul ei cu frecvenţa ω_2 şi se obţine o a doua frecvenţă de mixare $\omega_3-\omega_2$ care este de fapt frecvenţa ω_1. Generarea frecvenţei w_3 este totdeauna acompaniată de creşterea amplitudinii semnalului de frecvenţă ω_1 aşa cum rezultă din relaţiile Manley şi Rowe [9]. Efectele neliniare sunt mai intense în văile cuantice de potenţial datorită interacţiei puternice a acestora cu radiaţia şi densităţii de stări reduse [10,11]. Prin absorbţia fotonilor se generează perechi electron-gol care determină o modificare a constantelor optice datorită următoarelor fenomene: modificarea benzii interzise, lărgirea spectrului de absorbţie indusă de coliziunile purtătorilor de sarcină, umplerea benzilor cu electroni şi, respectiv, goluri, ecranarea interacţiunii electron-gol.

Intrucât în văile cuantice de potenţial efectele excitonice sunt intense,datorită efectelor neliniare apare fenomenul de "albire" (absenta absorbţiei) excitonică." Albirea" excitonică se poate descrie cu ajutorul a doi coeficienţi, secţiunea eficace de absorbţie neliniară, σ, şi indicele de refracţie neliniar η,

$$\alpha = \alpha_0 - \sigma N; \quad \bar{n} = \bar{n}_0 - \eta N \qquad (10.15)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde a_o si $\bar{n}_o$ sunt coeficientul de absorbţie şi,respectiv, indicele de refracţie pentru N=0 iar N este densitatea de electroni şi goluri. Variaţia lui σ şi η cu energia fotonilor, obţinutã experimental, este reprezentatã în Fig.3.11. Aceastã comportare este corelatã cu inegrala Kramers-Kronig. In Fig 3.12 este reprezentatã variaţia indicelui de refracţie raportatã la densitatea purtãtorilor de sarcinã, $\Delta\bar{n}/N$, în funcţie de densitatea purtãtorilor de sarcinã. Se observã cã acest raport creşte cu scãderea lãrgimii vãii cuantice de potenţial, L: curba 1 este pentru L=29,9 nm, curba 2 pentru L=15,2 nm, curba 3 pentru L=7,6 nm. Pentru comparaţie este reprezentatã curba 4 pentru semiconductorul masiv.

In vãile cuantice de potenţial s-a pus în ecvidenţã experimental saturaţia absorbţiei la temperatura camerei. Intensitatea radiaţiei I la care are loc saturaţia este definitã cu ajutorul relaţiei

$$\alpha = \alpha_o(1+\frac{I}{I_s})^{-1}$$

In fenomenele neliniare saturaţiei îi corespunde o densitate criticã de saturaţie a purtãtorilor de sarcinã, $n_{sat} \approx \pi a_B^{*2}$, care corespunde densitãţii de împachetare compactã a excitonilor. La saturaţie sunt umplute cu electroni toate stãrile pânã la energia kT

$$n_{sat} = g_{2D}.kT = \frac{m}{\pi\hbar^2}\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = \frac{\pi}{L^2} \approx \frac{\pi}{a_B^{*2}} \qquad (10.16)$$

pentru $L \approx a_B^*$ şi kT corespunzând distanţei dintre douã nivele energetice. Asupra efectelor neliniare în vãile cuantice de potenţial vom reveni în paragraful 3.11 intitulat Fotoreflectanta.

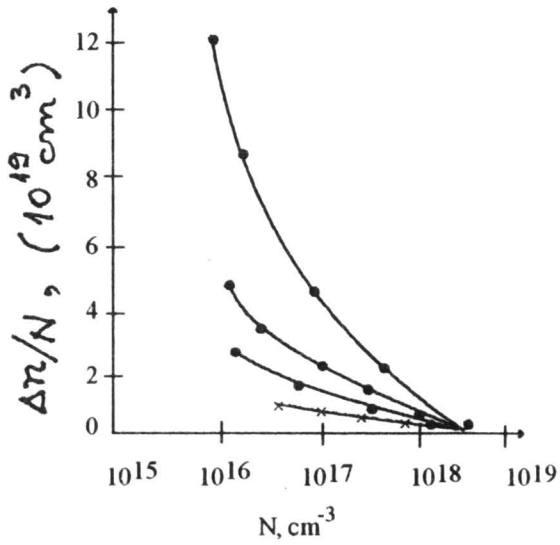


Fig. 3.12

3.10.2. *Efectele electrooptice.*

Efectele electrooptice se datorează modificãrii constantelor optice de cãtre câmpul electric aplicat. Cel mai cunoscut este efectul Franz-Keldish care constã în modificarea benzii de absorbţie datoritã înclinãrii benzilor de energie în câmpul electric F, aplicat (Fig.3.13). In acest caz,deoarece funcţiile de undã din banda de conducţie şi din banda de valenţã se extind puţin în banda interzisã (prezintã cozi) apare o absorbţie la o energie mai micã decât lãrgimea benzii interzise. In cazul 3δ coeficientul de absorbţie în prezenţa câmpului electric este dat de expresia (a se vedea Anexa)

$$\alpha(F) = M(\hbar\omega_F)^{1/2}\frac{1}{8\gamma}\exp(-\frac{4}{3}\gamma^{3/2})$$

$$M = \frac{2q^2}{m^2c\bar{n}\omega}|\mathbf{e}_o.\mathbf{p}_{cv}(0)|^2(\frac{2m_r}{\hbar^2})^{3/2}$$

$$\gamma = \frac{\omega_G-\omega}{\omega_F}; \quad \omega_F = \frac{(qF)^{2/3}}{(2m_r\hbar)^{1/3}}; \qquad \hbar\omega_G = E_g$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

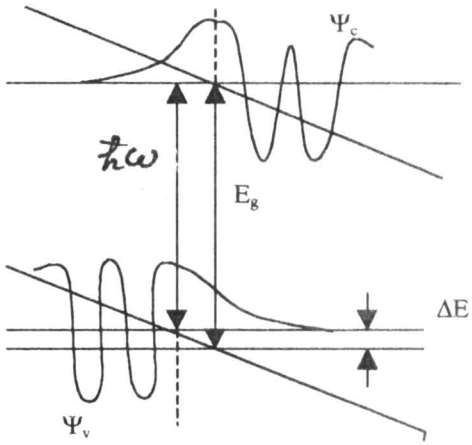


Fig. 3.13

pentru $\hbar\omega < E_g$. Pentru $\hbar\omega > E_g$ coeficientul de absorbţie are o comportare oscilatorie în funcţie de F. Aşa cum se observă în Fig.3.13 există o deplasare a marginii de absorbţie în câmp electric notată cu ΔE. După cum se observă în Fig. 3.14, această deplasare (micşorare) este mult mai mare în cazul văilor cuantice de potenţial. In acest caz se manifestă efectul Stark, specific acţiunii câmpului electric asupra nivelelor discrete de energie (efectul Franz-Keldish este specific benzilor de energie). In Fig .3.15 se reprezintă deplasarea maximului coeficientului de absorbţie şi a marginii absorbţiei cu câmpul electric aplicat în direcţia lărgimii văii cuantice de potenţial (adică perpendicular pe stratul subţire al văii).Curbele 1-5 sunt trasate pentru următoarele valori ale intensităţii câmpului electric F: $0{,}6.10^4$; 1, 1. 10^5; 1,5. 10^5, şi, respectiv, 2.10^5 V/cm. Deplasarea marginii de absorbţie depinde la câmp slab de pătratul câmpului electric. Absorbţia este excitonică (2D). Se observă de asemenea că cu creşterea câmpului electric aplicat scade suprapunerea funcţiilor de undă ale electronilor şi golurilor şi deci densitatea excitonilor (corelată cu maximul coeficientului de absorbţie). Menţionăm că totuşi în valea cuantică de potenţial excitonii se menţin până la inetnsităţi ale câmpului electric de ordinul 10^5V/cm pe când în materialul GaAs masiv aceştia se disociază la campuri de 10^3V/cm datorită energiei lor de legătură mai mici. In Fig.3.16 se reprezintă dependenţa coeficientului de absorbţie de energia fotonilor pentru diverse valori ale câmpului electric aplicat în planul stratului văii de potenţial. Se observă lărgirea picului la valori moderate ale lui F datorită faptului că în planul stratului văii excitonii sunt neconfinaţi, comportându-se asemenea excitonilor 3D. Curbele 1-3 sunt trasate pentru câmpurile de valori 0; $1{,}6.10^4$ şi respectiv $4{,}8.10^4$V/cm. Aşa cum am menţionat mai sus, în valea cuantică de potenţial simetrică , efectul Stark (deplasarea marginii de absorbţie în F) este cuadratic în câmpul electric [12]. In valea de potenţial asimetrică efectul Stark este liniar cu câmpul electric [13] De asemenea efect Stark liniar se obţine în văile cuantice cuplate. Deplasarea Stark se obţine şi în cazul fotoluminescenţei (emisia de radiaţie) excitonice în valea cuantică de potenţial. In plus, datorită micşorării suprapunerii funcţiilor de undă ale electronilor cu creşterea câmpului electric, creşte timpul de viaţă al purtătorilor de sarcină [14]. Deplasarea

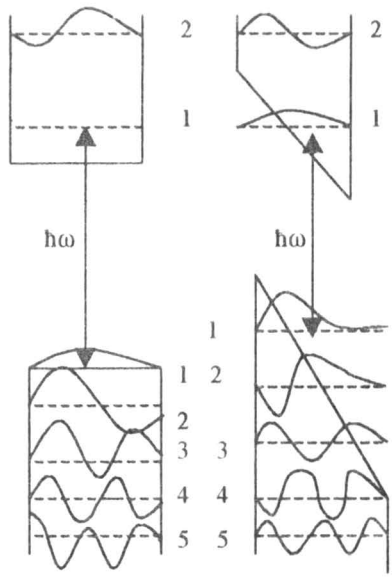


Fig. 3.14

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Stark în valea cuanticã de potenţial este o deplasare spre energii mai mici adicã spre lungimi de undã mai mari și se numește în general deplasare spre roșu. In superetele are loc o deplasare a marginii de absorbţie spre energii mai mari adicã spre lungimi de undã mai mici și se numește deplasare spre albastru.

Menţionãm cã denumirea de deplasare spre roșu și spre albastru datã relativ la culoarea la care ochiul omului este cel mai sensibil (culoarea galben-verde) se referã la o deplasare spre lungimi de undã mai mari și, respectiv, mai mici. Minibenzile permise din superreţele au lãrgimea ΔE de câteva zeci de meV. De aceea limita câmpurilor intense $qFd/\Delta E \geq 1$, unde d este perioada superretelei, poate fi explorata la campuri electrice moderate de ordinul a câteva zeci de kV/cm. Cu creșterea câmpului electric aplicat superreţeaua se comportã ca o serie de vãi cuantice necuplate și forma liniei de absorbţie opticã variazã de la profilul de minibandã la F=0 la o funcţie treaptã în câmp intens prezentând o deplasare spre albastru a marginii de absorbţie egalã cu semisuma largimii minibenzilor de conducţie ΔE_1 și de valenţã ΔH_1 [15].Treapta principalã ,care are loc la energia $E_g+E_1+H_1$ unde E_g este banda interzisã a vãii cuantice ($E_g=E_{co}-E_{vo}$) ,iar E_1 este mijlocul minibenzii ΔE_1 mãsurat de la E_{co} si H_1 este mijlocul minibenzii ΔH_1 mãsurat de la E_{vo}, este acompaniatã de altele mai mici situate la $E_g+E_1+H_1+pqFd$ (p=±1, ±2,"), corespunzând tranziţiilor electronului localizat în valea cuanticã n în golul din valea cuanticã n+p. Datoritã acestor tranziţii oblice coeficientul de absorbţie la o energie datã (fixatã) oscileazã cu câmpul electric și aceste oscilaţii sunt periodice cu F^{-1}. Spectrul obţinut se numește spectru de scarã Stark. Pentru a avea o imagine mai clarã ne reamintim cã superreţeaua constã dintr-o serie de vãi cuantice cuplate prin efect tunel rezonant. Cuplajul prin efect tunel se manifestã prin lãrgirea nivelelor de energie E_1 și H_1 corespunzãtoare vãii cuantice izolate,în minibenzi de lãrgime ΔE_1 și ΔH_1. Banda interzisã a superreţelei este mai micã decât banda interzisã a vãii cuantice izolate cu $(\Delta E_1+\Delta H_1)/2$. Când se aplicã un câmp electric în direcţia axei de creștere a superreţelei (a perioadei) nivelele energetice dintre douã vãi cuantice consecutive se deplasează cu qFd. Ca urmare, probabilitatea de tunelare se micșorează drastic și stãrile de energie tind sã se localizeze. O analizã pe baza funcţiei anvelopã, în aproximaţia electronilor cu asilegaţi, dã pentru coeficientul de absorbţie în superreţea, expresia [16]

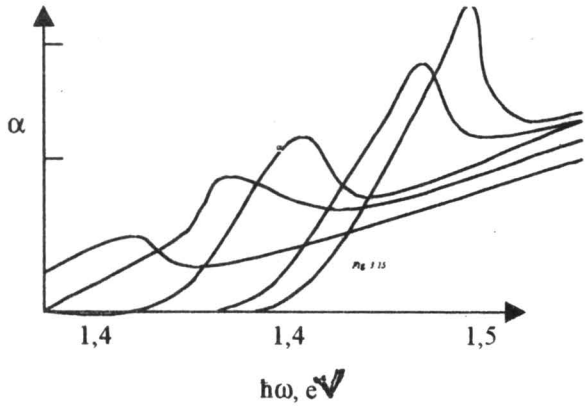


Fig. 3.15

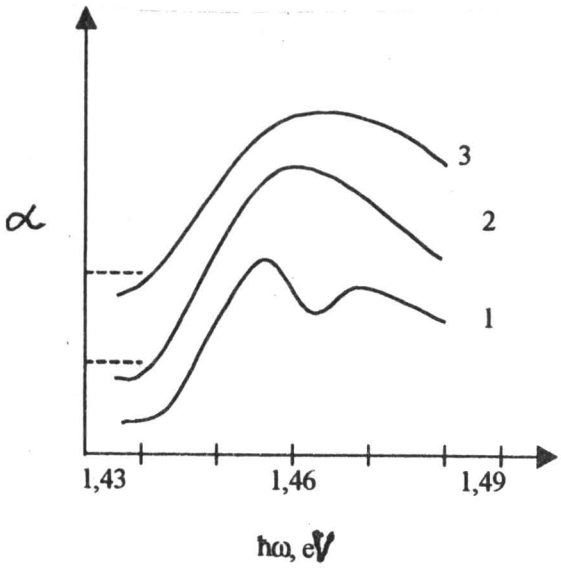


Fig. 3.16

$$\alpha(\hbar\omega) = (2N+1)\alpha_o \sum_{n=-N}^{n=+N} J_n^2(-\frac{2}{f})\Theta[\hbar\omega - (Eg + E_1 + H_1 + pqFd)]$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

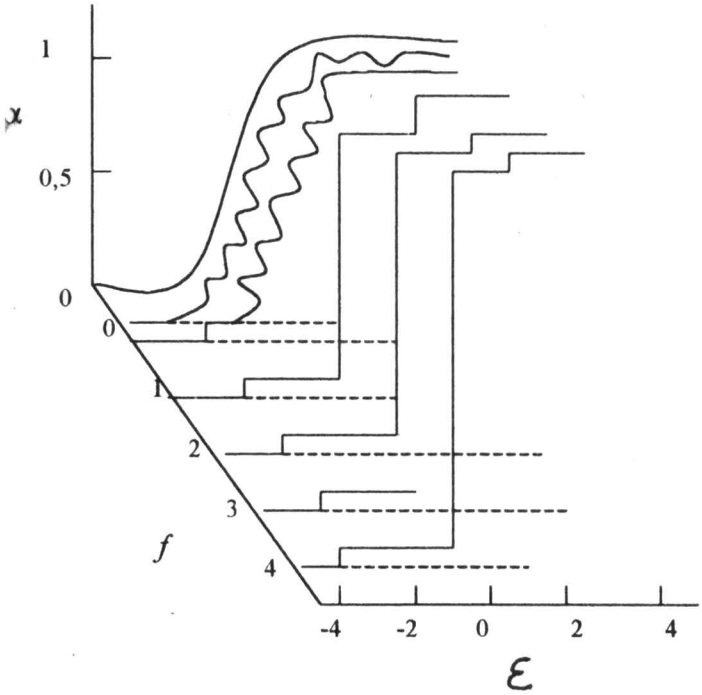
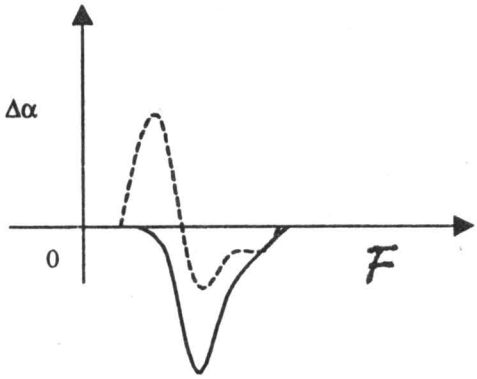
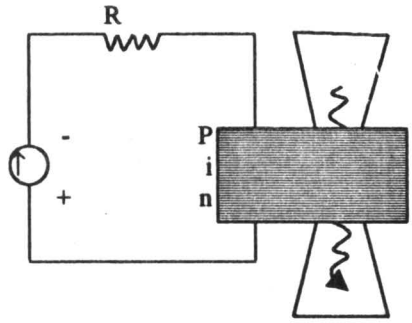


Fig. 3.17

unde (2N+1) este numărul de perioade ale supereţelei, J_n este funcţia Bessel de ordin întreg, $n.f=qFd/(l_c+l_v)$, l_c şi l_v reprezintă modulele integralelor de transfer (de acoperire) dintre două văi cuantice vecine relative la banda de conducţie şi, respectiv, de valenţă, $\alpha_o= 2pq^2|M|^2 m_r/ncm^2\hbar^2\omega$, $|M|^2$ este modulul pătrat al elementului de matrice al impulsului, Q este funcţia treaptă. In fig.3.17 se reprezintă dependenţa coeficientului de absorbţie normat la $(2N+1)\alpha_o$ în funcţie de energia redusă a fotonilor $\varepsilon=[\hbar\omega-(E_g+E_1+H_1)]/(l_c+l_v)$ pentru valori crescătoare ale câmpului eectric de fapt ale lui $f=qFd/(l_c+l_v)$ pentru o superreţea cu 41 perioade. Se observă caracterul oscilant al coeficientului de absorbţie cu F^{-1}. Conform cu definiţia funcţiei Θ la F=0 marginea benzii de absorbţie are loc la energia $\hbar\omega_o=E_g+E_1+H_1$.In câmpul electric F marginea de absorbţie are loc la energia $\hbar\omega_p = E_g + E_1 + H_1 + pqFd = \hbar\omega_o + pqFd$. Se observă că deplasarea marginii de absorbţie este liniară cu câmpul electric F. Pe lângă modificarea coeficientului de absorbţie câmpul electric modifică şi indicele de refracţie al materialului.Ambele efecte sunt corelate prin relaţiile Kramers-Kronig. Deoarece densităţile de stări ale electronilor şi golurilor sunt mai mici decât în cazul 3D, umplerea cu electroni şi, respectiv, goluri, a acestor stări se face la intensităţi mai mici ale radiaţiei absorbite. Dacă banda se umple până la o energie egală cu un Rydberg, ~10 meV în valea cuantică de potenţial din GaAs, atunci efectele excitonice sunt suprimate. Modificarea coeficientului de absorbţie indusă de către purtătorii de sarcină (prin umplerea benzilor) este de acelaşi ordin de mărime cu cea dată de efectul Stark. Insă, deoarece în primul caz modificarea coeficientului de absorbţie păstrează acelaşi semn (Fig.3.18b, curba plină), modificarea indicelui de refracţie este mai mare decât în al doilea caz unde Δα schimbă de semn (curba întreruptă pe Fig.3.18b). $\Delta\alpha=\alpha-\alpha_o$ unde a_o este valoarea coeficientului de absorbţie în absenţa câmpului electric şi a umplerii benzilor de energie. Efectele electrooptice au numeroase aplicaţii, dintre care amintim modulatorul de lumină electrooptic, ce constituie o componentă majoră a sistemelor optice de calcul. Modulatorul elecrooptic cu vale cuantică de potenţial are viteza mai mare de comutare decât cel cu semiconductor masiv, deoarece densitatea purtătorilor de sarcină generaţi este mai mică.Viteza de comutare este limitată numai de constanta de timp RC a circuitului electric total. Un dispozitiv bistabil cu vale cuantică de potenţial este reprezezentat în Fig.3.19. Mai multe văi cuantice sunt introduse între regiunile p şi n ale unei joncţiuni p-n.Ele joacă rol atât de fotodetector cât şi de modulator. Energia fotonilor incidenţi corespunde poziţiei liniei întrerupte din Fig.3.19b. Când structura nu este iluminată, toată căderea de tensiune (10V) se aplică pe structură şi absorbţia este

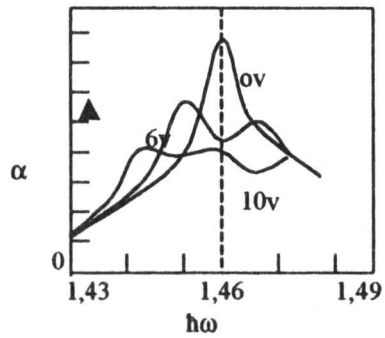
https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro





a)

Fig. 3.18



b)

Fig. 3.19

slabă. Când se aplică lumina, crește fotocurentul prin structură, tensiunea pe aceasta se micșorează și crește tensiunea pe rezistența R. Structura trece în starea de absorbție mare, tensiune mică și curent mare. Circuitul este bistabil deoarece prin micșorarea intensității luminii aplicate, structura trece în starea de tensiune mare, curent mic și absorbție slabă. Puterea și viteza de comutare se reglează cu ajutorul rezistenței R. Constanta de timp a circuitului este egală cu RC unde C este capacitatea dispozitivului electrooptic. Energia de comutare este egală cu $CV^2/2 \approx 1{,}7.10^{-7} J/cm^2$, care este de o sută de ori mai mică decât energia de comutare necesară pentru a produce aceeași modificare a absorbției în văi cuantice multiple numai pe baza umplerii benzilor cu electroni (absorbție neliniară, ec. (3.16), fără efect Stark și cu mult mai mică decât în dispozitivele semiconductoare uzuale. Acest dispozitiv se utilizează în circuitele logice. Recent s-a realizat din InGaAs-AlGaAs un modulator pentru raze X care comută reflectivitatea de la 6% la 60% și simultan, transmisia dela 60% la 6%[17].

3.11. *Fotoreflectanța*

Fotoreflectanța constă în modificarea reflectanței de către purtătorii de sarcină generați de către radiație sau de către alte mecanisme induse de radiație. Ea se utilizează ca metodă de modulare a unui fascicul de radiație fără să fie necesare contacte electrice. De asemenea se utilizează pentru determinarea intervalului energetic dintre subbenzile de energie în văile cuantice sau dintre minibenzi în superrețele și pentru obținerea de informații asupra lărgimii liniei spectrale și caracterului interacției dintre excitoni și defecte sau purtătorii generați de radiație. Coeficientul de reflexie a radiației la incidență oblică pe o vale cuantică este dat de expresia [18]

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$R = \overline{R}(\varphi_o)[1 + S(\varphi_o)F(\beta,\Phi)]$$

$$S(\varphi_o) = \frac{8\sqrt{\varepsilon - \sin^2\varphi_o}}{\varepsilon - 1} \times \begin{cases} \cos\varphi_o, \text{ unda polarizata s} \\ \dfrac{\varepsilon\cos\varphi_o}{\varepsilon\cos^2\varphi_o - \sin^2\varphi_o}, \text{unda polarizata p} \end{cases}$$

$$\overline{R} = r_{01}^2; \qquad r_{01}^s(\varphi_o) = \frac{\cos\varphi_o - \sqrt{\varepsilon - \sin^2\varphi_o}}{\cos\varphi_o + \sqrt{\varepsilon - \sin^2\varphi_o}}$$

$$r_{o1}^p = \frac{\sqrt{\varepsilon - \sin^2\varphi_o} - \varepsilon\sin\varphi_o}{\sqrt{\varepsilon - \sin^2\varphi_o} + \varepsilon\sin\varphi_o} = -\frac{(\varepsilon - 1)(\varepsilon\cos^2\varphi_o - \sin^2\varphi_o)}{(\sqrt{\varepsilon - \sin^2\varphi_o} + \varepsilon\cos\varphi_o)^2}$$

$$F(\beta,\Phi) = \frac{\tilde{\omega}}{\Gamma}\frac{\sin\Phi + \beta\cos\Phi}{1 + \beta^2}$$

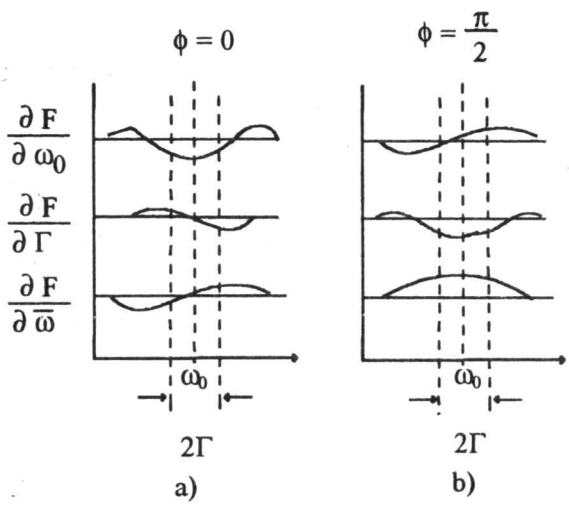


Fig. 3.20

unde

$$\beta = (\omega - \omega_o)/\Gamma; \quad \Phi = 2\phi_1 + \phi_2 + \pi/2$$

ϕ_o este unghiul de incidenţă, ε este constanta dielectricã a materialului din barierã. Se neglijeazã dependenţa de frecvenţă a lui ε deoarece se considerã o regiune spectralã îngustã în jurul frecvenţei de rezonanţă a excitonului 1s în valea cuanticã. De asemenea se presupune, pentru simplitate, cã constanta dielectricã localã în valea cuanticã este egalã cu ε; $\phi_1 = k_{1x}d_1$ este deplasarea de fazã a undei luminoase după ce traversează stratul 1 de grosime d_1 al barierei, $k_{1x} = k_o(\varepsilon - \sin^2\phi_o)^{1/2}$, k_o este modulul vectorului de propagare a undei în vid, $\phi_2 = k_{1x}a$ unde a este grosimea văii cuantice, ω_o este frecvenţa de rezonanţă, ω este frecvenţa radiaţiei incidente, G este coeficientul de amortizare a radiaţiei dat de excitonii 1s,

$$\tilde{\omega} = C\frac{\pi k_o^2}{2k_{1x}} f^{(3D)} a_B^{*2} [\int dx \varphi_{1s}(0, x_e, x_h) e^{ik_{1x}\overline{x}}]^2$$

$\overline{x} = x - \overline{x}_a; \overline{x}_a$ este centrul văii cuantice, $f^{(3D)}$ este forţa oscilatorului pentru excitonul 1s în spaţiul tridimensional

$$f^{(3D)} = \frac{4q^2}{a_B^{*2} m\omega} \frac{p_{cv}^2}{m\hbar\omega}$$

a_B^* este raza efectivã Bohr, C=1 pentru lumina polarizatã s (adicã unda TE, în care vectorul câmp electric al undei este perpendicular pe vectorul sãu de undã şi pe direcţia x a lãrgimii văii cuantice, iar câmpul magnetic al undei se aflã în planul determinat de vectorul de undã şi

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

direcţia x); $C=\cos 2\varphi=1-(2\sin^2\varphi_o/\varepsilon)$ pentru lumina polarizată p (adică unda TM, în care câmpul magnetic este perpendicular pe vectorul de undă al undei şi pe direcţia x);$\varphi(0,x_e,x_h)$ este funcţia de undă care descrie mişcarea excitonului în direcţia x în care x_e şi x_h reprezintă coordonatele electronului şi golului (în direcţia x) care formează excitonul. $F(\beta,\Phi)$ reprezintă contribuţia excitonilor din valea cuantică la coeficientul de reflexie. Spectrul fotoreflexiei la rezonanţă poate fi descris în presupunerea că radiaţia modifică unii parametri care determină constanta dielectrică şi anume frecvenţa de rezonanţă, forţa oscilatorului şi coeficientul de amortizare. Pentru variaţii mici ale lui F, spectrul fotoreflectanţei este determinat de expresia

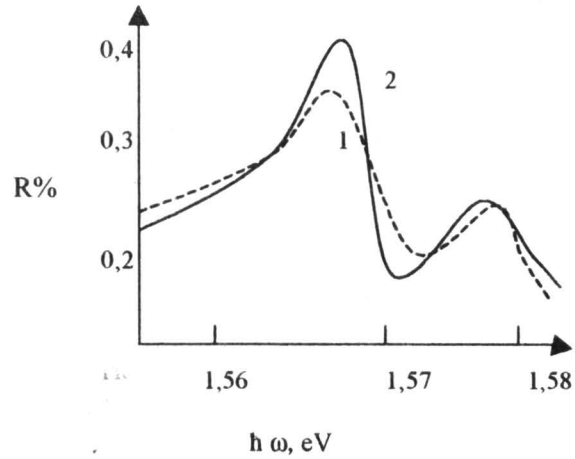


Fig. 2.21

$$\Delta R \sim \frac{\partial F}{\partial \omega_o}\Delta\omega_o + \frac{\partial F}{\partial \omega}\cdot\Delta\omega + \frac{\partial F}{\partial \Gamma}\Delta\Gamma$$

unde $\Delta\omega_o$,$\Delta\varpi$ si $\Delta\Gamma$ sunt deviaţiile de la valorile de întuneric induse de către radiaţie,ale lui ω_o,ϖ şi Γ. Răspunsul spectral determinat de fiecare din cele trei derivate este reprezentat în Fig.3.20 a şi b, în Fig.3.20a pentru $\Phi=2\pi N$ iar în Fig.3.20b pentru $\Phi=2\pi N+\pi/2$ unde N este număr întreg sau zero. Se observă că răspunsul spectral este determinat de faza Φ.Faza Φ poate fi determinată din spectrul reflectanţei în absenţa iluminării adiţionale. Din compararea formei spectrului măsurat $\Delta R(\omega)$ cu spectrele corespunzătoare celor trei derivate ale funcţiei $F(\beta, \Phi)$ se poate determina mecanismul dominant al fotoreflectanţei. In Fig.3.21 se reprezintă rezultatele experimentale obţinute pentru reflexia oblică la echilbru (curba 1), şi în condiţiile unei iluminări adiţionale (curba 2) pentru valea cuantică AlGaAs/GaAs. Diferenţa dintre cele două curbe reprezintă fotoreflectanţa.Calculele teoretice coincid cu rezultatele experimentale. Primul maxim reprezintă energia excitonului 1s electron-gol greu iar al doilea maxim corespunde energiei excitonului 1s electron-gol uşor.

3.12. *Rolul neregularităţilor de interfaţă asupra spectrului excitonic din valea cuantică de potenţial.*

Am observat în paragrafele precedente că excitonii 2D interacţionează foarte puternic cu fotonii datorită suprapunerii funcţiilor de undă ale electronilor şi golurilor din valea cuantică de potenţial. Efectele excitonice, care sunt intense chiar la temperatura camerei,au fost puse în evidenţă prin experienţe de absorbţie, reflexie, elipsometrie, fotoreflexie, luminescenţă, etc. Energia fotonului emis prin recombinarea electronului din exciton cu golul greu (din exciton) din subbanda n=1 este dată de expresia

$$\hbar\omega = E_g + E_{e1} + E_{h1} - E_{ex}(2D)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde E_g este banda interzisa (3D),E_{e1} este nivelul electronic 1, E_{h1} este nivelul 1 al golurilor grele iar E_{ex} este energia de legãturã a excitonului 2D. Nivelele de energie a electronilor în valea de potenţial infinit de adâncã sunt date de expresia

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_e}(\frac{n}{L})^2, \qquad n = 1,2,3,...$$

O abatere ΔL în lãrgimea vãii cauzeazã o abatere ΔE_1 a nivelului E_1 egalã cu

$$\Delta E_1 = -\frac{\hbar^2\pi^2}{m_c L^2}\Delta L \tag{12.1}$$

Dacã presupunem cã poziţiile interfeţelor vãii cuantice variazã statistic de-a lungul axelor y şi z (presupunem lãrgimea vãii situatã de-a lungul axei x), atunci distribuţia lãrgimii vãii este statisticã şi poate fi descrisã de cãtre distribuţia gaussianã. Prin urmare, în acord cu ec.(12.1), existã o distribuţie gaussianã a energiei în jurul nivelului n=1. Energia E_{ex}(2D) reprezintã 1% din lãrgimea benzii interzise şi în primã aproximaţie se poate neglija lãrgirea sa datoratã distribuţiei lãrgimii vãii. Dacã presupunem cã stãrile excitonice sunt ocupate pe un domeniu de energie mult mai mic decât lãrgirea descrisã de ec.(12.1), atunci forma liniei de recombinare excitonicã are caracter gaussian; aceastã situaţie este valabilã la intensitãţi mici de excitare şi la temperaturi joase. Semilãrgimea liniei radiaţiei de recombinare este corelatã cu semilãrgimea distribuţiei lui L prin relaţia

$$\Delta L = \Delta(\hbar\omega)\frac{\mu L^3}{\hbar^2\pi^2} \tag{12.2}$$

unde μ este masa redusã a excitonului. Rezultã cã funcţia de distribuţie a intensitãţii luminescenţei reproduce funcţia de distribuţie a lãrgimii vãii cuantice de potenţial. Funcţia de distribuţie gaussianã a lãrgimii liniei de luminescenţã este de forma [19]

$$P(E_g, E_g) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp[-\frac{(E_g - E_g)^2}{2\sigma^2}]$$

unde deviaţia standard

$$\sigma = \left|\frac{\partial E_g(L)}{\partial L}\right|_L .\delta$$

pentru E_g(L) o funcţie strict monotonã; δ este deviaţia standard a distribuţiei valorilor lui L,E_g este intervalul dintre nivelele de electroni şi de goluri pentru n=1 iar E_g este valoarea sa medie, corespunzãtoare valorii medii a lui L. Dependenţa de L a lui E_g pentru o vale cuanticã cu interfeţele GaAs/$Al_{0,4}Ga_{0,6}As$ (100) este reprezentatã în Fig.3.22. Linia plinã este relativã la nivelul golurilor grele iar linia întreruptã este relativã la nivelul golurilor uşoare. Pentru probe preparate în condiţii optime s-a observat o creştere a lãrgimii liniei cu scãderea lãrgimii vãii cuantice. Aceasta se poate datora variaţiei energiei de confinare cu fluctuaţiile lãrgimii vãii, care cresc cu scãderea acesteia. In procesul de creştere unui strat atomic peste alt strat atomic ne aşteptãm sã aparã insule, în care lãrgimea vãii sã varieze cu δ=0,5a din grosimea medie a

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unui monostrat, unde a ste grosimea unui monostrat (strat atomic). Prin urmare, diverse zone din strat corespund la diverse energii de confinare, ceea ce determinã lãrgirea liniilor spectrale de absorbţie şi de emisie, deoarece banda de absorbţie excitonicã este dezordonatã spaţial. Astfel se pune în evidenţã interdifuzia Al în stratul văii de potenţial.

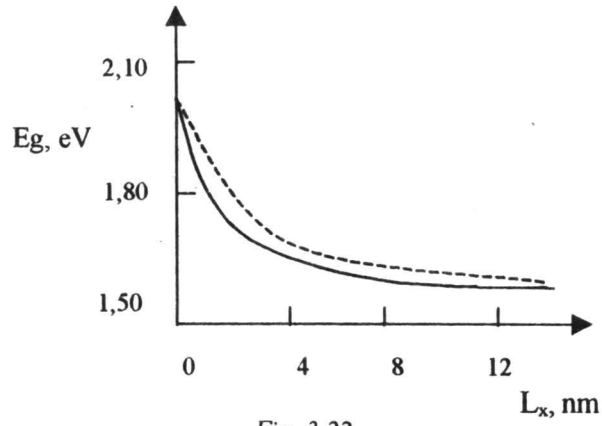


Fig. 3.22

3.13. *Rezonanţa ciclotronicã (diamagneticã).*

Rezonanţa ciclotronicã este o metodã experimentalã din care se obţin informaţii complete şi precise asupra spectrului de energie a purtãtorilor de sarcinã. Intr-un câmp magnetic de inducţie **B** , un purtãtor de sarcinã, electron sau gol, de masã efectivã m descrie o orbitã circularã într-un plan perpendicular pe câmpul magnetic. Raza orbitei este $r=v_t/\omega_c$ unde v_t este componenta vitezei particulei încãrcate perpendicularã (tarnasversalã) pe câmpul magnetic iar

$$\omega_c = \frac{qB}{m} \tag{13.1}$$

este frecvenţa ciclotronicã.Intr-o experienţã de rezonanţã ciclotronicã, pe lângã câmpul constant **B** se mai aplicã un câmp electromagnetic de înaltã frecvenţã, care oscileazã într-un plan perpendicular pe **B**. Dacã frecvenţa ω a acestui câmp coincide cu ω_c apare un maxim în spectrul de absorbţie a radiaţiei de înaltã frecvenţã. Determinând $\omega=\omega_c$ la care apare rezonanţa, din relaţia (13.1) se determinã direct masa efectivã m. Mişcarea particulei încãrcate are loc ca într-un ciclotron; de aceea efectul poartã numele de rezonanţã ciclotronicã. Din punctul de vedere al mecanicii cuantice rezonanţa ciclotronicã poate fi consideratã ca tranziţia între douã nivele Landau adiacente,între care existã o diferenţã de energie $\hbar\omega_c$ .In cele ce urmeazã vom prezenta teoria elementarã clasicã a rezonanţei ciclotronice. Ecuaţia de mişcare a unui electron de sarcinã q şi masã efectivã m într-un câmp magnetic **B**, un câmp electric de înaltã frecvenţã **F** (se poate neglija efectul câmpului magnetic al radiaţiei de înaltã frecvenţã) şi asupra cãruia acţioneazã o forţã de frânare $\mathbf{F}=-m\mathbf{v}/\tau$ este de forma

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{m\mathbf{v}}{\tau} + q(\mathbf{F} + \mathbf{v}\times\mathbf{B}) \tag{13.2}$$

unde **v** este viteza electronului şi τ este timpul de relaxare determinat de fenomenele de împrastiere pe fononi şi alte imperfecţiuni ale reţelei. Atunci când **B** este orientat de-a lungul axei z si $\mathbf{F}=\mathbf{F}_0\exp(-i\omega t)$ este orientat de-a lungul axei x iar **v** este proporţional cu $\exp(-i\omega t)$ proeicţiile ecuaţiei (13.2) pe axele x şi y sunt următoarele

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$m(-i\omega+\frac{1}{\tau})v_x = qF_x + qv_yB$$
$$m(-i\omega+\frac{1}{\tau})v_y = -qv_xB \qquad (13.3)$$

Densitatea de curent electric este dată de legea lui Ohm

$$j=\sigma F_x=nqv_x \qquad (13.4)$$

unde σ este conductivitatea și n este concentrația electronilor.Eliminând v_y din ec. (12.3) se obține conductivitatea complexă

$$\sigma = \frac{nqv_x}{F_x} = \sigma_o \frac{1-i\omega\tau}{1+(\omega_c^2-\omega^2)\tau^2-2i\omega\tau} \qquad (12.5)$$

unde

$$\sigma_o = \frac{nq^2\tau}{m} = nq\mu$$

este conductivitatea la $\omega=\omega_c=0$ în câmp electric constant $F_x=F_o$ și în absența câmpului magnetic (B=0). Absorbția radiației elctromagnetice de înaltă frecvență este proporțională cu partea reală a conductivității σ

$$\mathrm{Re}\,\sigma = \sigma_o \frac{1+(\omega_c^2+\omega^2)\tau^2}{(1+\omega_c^2\tau^2-\omega^2\tau^2)^2+4\omega^2\tau^2} \qquad (12.6)$$

Considerăm următoarele cazuri limită.

1.ω_c>>ω, ω_c t>>1. In acest caz câmpul electric continuu este intens iar câmpul electric alternativ este de joasă frecvență. Din (12.6) se obține

$$\mathrm{Re}\,\sigma \approx \frac{\sigma_o}{\omega_c^2\tau^2} \sim 1/B^2$$

adică absorbția este proporțională cu $1/B^2$. 2. ω_c >>ω, ω_c τ<<1. In acest caz câmpul magnetic este slab (sau t este mic) iar câmpul electric alternativ este de joasă frecvență. Se obține

$$\mathrm{Re}\sigma=\sigma_o\,(1-\omega_c^2\tau^2)$$

Notând rezistivitatea $\rho=1/\sigma$ astfel că $\Delta r/r=-\Delta\sigma/\sigma$, rezultă

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \omega_c^2\tau^2 = (1/\mu B)^2$$

Acesta coincide, cu excepția uni factor numeric, cu rezultatul obținut din teoria cinetică. 3.$\omega\tau$>>1,ω_c=0. In acest caz nu se aplică câmp magnetic iar radiația electromagnetică este radiație de înaltă frecvență (de exemplu în infraroșu). Coeficientul de absorbție este proporțional cu

$$\mathrm{Re}\,\sigma \approx \frac{\sigma_o}{\omega^2\tau^2}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

4.$\omega\tau=\omega_c\tau>>1$. Aceasta este condiţia de rezonanţă ciclotronică.In acest caz din ec. (12.6) se obţine

$$\mathrm{Re}\,\sigma \approx \frac{\sigma_o}{2}$$

Se observă că la rezonanţă ciclotronică conductivitatea este de două ori mai mare decât în câmp electric constant. Acest rezultat se obţine deoarece am considerat radiaţia electromagnetică polarizată liniar ($F_y=0$). Dacă radiaţia electromagnetică este poarizată circular, $\mathrm{Re}\sigma/\sigma_o$ este egal cu unitatea. In Fig.3.23 se reprezintă $\mathrm{Re}\sigma/\sigma_o$ în funcţie de ω_c/ω pentru diverse valori ale lui $\omega\tau$. Se observă că pentru $\omega\tau=2$ apare un maxim în curba de absorbţie la $\omega=\omega_c$. In această situţie este îndeplinită condiţia de rezonanţă ciclotronică $\tau>>1/\omega_c$, de stabilitate a unei orbite circulare. Prezentăm în continuare teoria rezonanţei ciclotronice când spectrul de energie a electronilor prezintă mai multe minime echivalente în spaţiul **k**; în vecinătatea unui minim suprafeţele de energie constantă sunt elipsoizi de revoluţie (siliciu-n, germaniu-n). In acest caz energia electronior se scrie

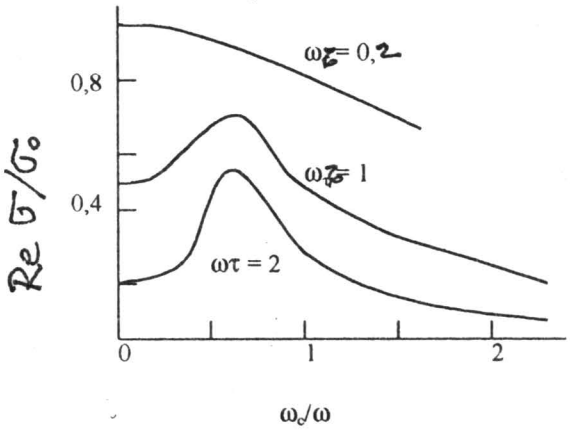


Fig. 3.23

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_1^2}{m_1} + \frac{k_2^2}{m_2} + \frac{k_3^2}{m_3}\right) \qquad (13.7)$$

unde vectorul de undă **k** se măsoară faţă de punctul de minim $\mathbf{k}_o$ iar indicii 1,2,3 corespund coordonatelor rectangulare care coincid cu axele principale ale elipsoidului. In cazurile Si-n şi Ge-n suprafeţele de energie constantă din apropierea minimelor sunt elipsoizi de revoluţie, astfel că $m_1=m_l$, masa longitudinală, şi $m_2=m_3=m_t$, masa transversală. Din (12.7) se obţin componentele vitezei electronului

$$v_i = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k_i} = \frac{\hbar k_i}{m_i} = \frac{p_i}{m_i}, \qquad i = 1,2,3 \qquad (13.8)$$

Neglijând în ec.(13.2) forţa de frânare şi câmpul electric de înaltă frecvenţă deoarece le considerăm perturbaţii mici se obţine

$$\frac{d(\hbar\mathbf{k})}{dt} = -q\mathbf{v}\times\mathbf{B}$$

Având în vedere (12.8) rezultă

$$\begin{aligned} m_1\frac{dv_1}{dt} &= -qv_2B_3 + qv_3B_2 \\ m_2\frac{dv_2}{dt} &= -qv_3B_1 + qv_1B_3 \\ m_3\frac{dv_3}{dt} &= -qv_1B_2 + qv_2B_1 \end{aligned} \qquad (13.9)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde $B_1=B\alpha_1, B_2=B\alpha_2, B_3=B\alpha_3$ sunt proiecţiile câmpului magnetic pe axele de coordonate iar $\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3$ sunt cosinuşii directori pe direcţiile respective. Substituind în (12.9)

$$v_1=v_{o1}e^{-Iwt}, v_2=v_{o2}e^{-iwt}, v_3=v_{o3}e^{-Iwt}$$

se obţine

$$\begin{aligned} &-im_1\omega v_{1o}+qB_3v_{2o}-qB_2v_{3o}=0 \\ &qB_3v_{1o}+im_2\omega v_{2o}-qB_1v_{3o}=0 \\ &qB_2v_{1o}-qB_1v_{2o}-im_3\omega v_{3o}=0 \end{aligned} \tag{13.10}$$

Acesta este un sistem de ecuaţii liniare omogene cu necunoscutele v_{1o}, v_{2o}, v_{3o}. El are soluţii diferite de zero numai dacă determinantul sistemului este egal cu zero. Egalând cu zero determinantul sistemului (12.10) obţinem o ecuaţie caracteristică de gradul trei în ω care are rădăcinile $\omega=0$ şi

$$\omega^2=\omega_1^2\alpha_1^2+\omega_2^2\alpha_2^2+\omega_3^2\alpha_3^2 \tag{12.11}$$

unde

$$\omega_1=\frac{qB}{\sqrt{m_2m_3}},\ \omega_2=\frac{qB}{\sqrt{m_1m_3}},\qquad \omega_3=\frac{qB}{\sqrt{m_1m_2}} \tag{13.12}$$

Frecvenţa $\omega=0$ corespunde mişcării electronului de-a lungul câmpului magnetic. Frecvenţa $\omega=\omega_c$(12.11) este frecvenţa ciclotronică corespunzătoare mişcării electronului într-un plan perpendicular pe câmpul magnetic. Dacă direcţia câmpului magnetic coincide cu axa 1 atunci $\alpha_1=1, \alpha_2=\alpha_3=0$ si $\omega_c=\omega_1$. Determinând frecvenţa ciclotronică din condiţia de maxim al absorbţiei pentru diverse orientări ale câmpului magnetic faţă de cristal, adică pentru valori diferite ale $\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3$ se pot determina ω_1,ω_2 şi ω_3 şi deci componentele tensorului masei efective m_1,m_2,m_3. Aşa cum am amintit mai sus, suprafeţele de energie constantă în Si-n şi Ge-n sunt elipsoizi de revoluţie, astfel că $m_1=m_l, m_2=m_3=m_t$. Dacă câmpul magnetic face unghiul θ cu axa 1 atunci $\alpha_1^2=\cos^2\theta$ şi $\alpha_2^2+\alpha_3^2=1-\alpha_1^2=\sin^2\theta$.Astfel din (13.11) rezultă

$$\omega_c^2=(qB)^2\left[\frac{\cos^2\theta}{m_t^2}+\frac{\sin^2\theta}{m_tm_l}\right] \tag{13.13}$$

Măsurând ω_c pentru valori diferite ale lui θ se determină m_t şi m_l. Se poate introduce masa ciclotronică efectivă, m_c

$$\omega_c=qB/m_c \tag{13.14}$$

Având în vedere (13.13) se obţine

$$\frac{1}{m_c^2}=\frac{\cos^2\theta}{m_t^2}+\frac{\sin^2\theta}{m_tm_l} \tag{13.15}$$

m_c depinde de m_t, m_l şi de q. Intr-un semiconductor cu benzi de energie neparabolice, anizotrop

$$E=\frac{\hbar^2k_x^2}{2m_l}+\frac{\hbar^2k_t^2}{2m_t}+\Lambda k_x^4$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

energia electronului în prezenţa câmpului magnetic în aproximaţia liniară în L este dată de expresiile

$$E_{nk_x} = \hbar\omega_{c,l}(n+\frac{1}{2}) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_l} + \Lambda k_x^4$$

când $\mathbf{B}||x$ și

$$E_{nk_y} = \hbar\omega_{c,t}[n+\frac{1}{2} + \Lambda(\frac{m_l}{\hbar^2})^2 \hbar\omega_{c,t}\frac{3}{4}(2n^2+2n+1)] + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_t}$$

când $\mathbf{B}||y$, unde n este numărul cuantic Landau. Frecvenţele $\omega_{c,l}$ și $\omega_{c,t}$ sunt corelate cu masele ciclotron $m_{c,l}$ și $m_{c,t}$ prin relaţia (12.14). In câmp longitudinal ($\mathbf{B}||x$) nivelele sunt situate la aceeași distanţă între ele pe când în câmp magnetic transversal distanţa dintre nivelele n și n+1 depinde de n

$$E_{(n+1),k_y} - E_{n\,k_y} = \hbar\omega_c[1+\Lambda(\frac{m_l}{\hbar^2})^2 \hbar\omega_{c,t}3(n+1)$$

Atunci când legea de dispersie $E(\mathbf{k})$ are o forma mai complexă decât (12.7) , pentru determinarea masei ciclotronice m_c se utilizează aproximaţia cuasiclasică

$$m_c(E,k_{x'}) = \frac{\hbar^2}{2\pi}\iint dk_{y'}dk_{z'}\delta(E-E_k) \qquad (13.16)$$

unde x′este axa orientată de-a lungul câmpului magnetic în sistemul de coordonate x′,y′,z′.

3.14. *Masa efectivă a electronului în superreţele.*

Energia electronului în minibanda n a unui semiconductor se poate dezvolta după puterile vectorului de undă K

$$E_n(\mathbf{K}) = E_n^o + \frac{\hbar^2 K_x^2}{2M_t} + \frac{\hbar^2 K_t^2}{2M_t} + \Lambda_1 K_x^4 + \Lambda_2 K_t^4 + \Lambda_3 K_x^2 K_t^2 \qquad (14.1)$$

Noi am găsit in cap. 2 relaţia de dispersie a energiei electronului în cazul unei superreţele cu bariere subţiri folosind modelul Kronig-Penney și în cazul unei superreţele cu bariere groase folosind aproximaţia electronilor cuasilegaţi. Relaţia (2.7.4) obţinută în modelul Kronig-Penney poate fi reprezentată într-o formă similară cu relaţia (2.17.3) pentru unde normale într-o superreţea optică

$$1-\cos K_x d = \frac{1}{2}\sin(ka)\sinh(k_l b)f_1 f_2 \qquad (14.2)$$

unde

$$k = (\frac{2m}{\hbar^2}E - K_t^2)^{1/2}; \quad k_l = [\frac{2m_l}{\hbar^2}(U_o - E) + K_t^2]^{1/2}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

m este masa efectivã a electronului din valea de potenţial iar m_1 este masa efectivã din barierã. Energia E se mãsoarã de la marginea inferioarã a benzii de conducţie a vãii de potenţial. Masele efective se presupun izotrope iar

$$f_1=\tan\phi_a-\gamma\tanh\phi_b; \qquad f_2=\gamma^{-1}\tan\phi_a+\cot\tanh\phi_b \tag{14.3}$$

$$\phi_a=ka/2; \qquad \phi_b=k_1b/2; \qquad \gamma=\frac{m}{m_1}\frac{k_1}{k}.$$

Scriem condiţiile de frontierã în forma generalã

$$\begin{pmatrix} F_A \\ \tilde{r}_A \end{pmatrix} = \hat{M}_{AB}\begin{pmatrix} F_B \\ \tilde{r}_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} F_B \\ \tilde{r}_B \end{pmatrix}$$

unde

$$F_A = l(\frac{\partial F_A}{\partial x}); \quad F_B = l\frac{m}{m_1}(\frac{\partial F_B}{\partial x})$$

l este o lungime fixatã,aleasã arbitrar. Matricea $\dot{M}_{AB}$ satisface condiţia de conservare a fluxului de particule la interfata

$$\det \dot{M}_{AB} = M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21} = 1$$

Matricea $\dot{M}_{BA}$ diferã de matricea $\dot{M}_{AB}$ prin semnul elementelor nediagonale. Pentru soluţii de tip Bloch, matricea de transfer pe o perioadã a superreţelei $\dot{M} = \dot{M}_{AB}\dot{M}_{BA}$ satisface relaţia

$$\det\left\| M_{ij} - e^{iK_x d}\delta_{ij} \right\| = 0$$

sau

$$2\cos K_x d = M_{11}+M_{22} \tag{14.4}$$

unde s-a luat în considerare identitatea $\det \dot{M} = 1$.Ec.(14.4) se reduce la ec.(14.2) dacã utilizãm notaţiile

$$f_1=(M_{11}-M_{12}\rho\tanh\phi_b)\tan\phi_a-\gamma(M_{22}\tanh\phi_b-M_{21}\rho^{-1})$$

$$f_2=\gamma^{-1}(M_{11}-M_{12}\rho\cot\tanh\phi_b)\cot\tan\phi_a+M_{22}\cot\tanh\phi_b-M_{21}\rho^{-1}$$

unde $\rho=(m/m_1)k_1l$.

In continuare pentru calculul masei efective folosim ec.(14.2). Din aceastã ecuaţie rezultã cã energia electronului E_n°, la K=0, satisface una din ecuaţiile

$$f_1=0 \quad \text{sau } f_2=0$$

pentru soluţiile $\chi_n(\mathbf{r})$ pare sau impare la reflexia în planul (y,z) care trece prin centrul vãii sau barierei. Sã analizãm întâi spectrul de energie a electronilor la valori mici ale lui **K**.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Pentru a găsi masa efectivă longitudinală M_l dezvoltăm partea stângă a ec.(13.2) după puterile lui $K_x d$ iar partea dreaptă, pe care o notăm cu $\tilde{P}$,după puterile lui $E-E^o$.Se obține

$$M_l = (\frac{\hbar}{d})^2 (\frac{\partial \tilde{r}}{\partial E})_{E=E^o}$$

Funcția $\tilde{P}$ este corelată cu funcția P din ec.(2.7.4) prin relația $\tilde{P}=1-P$.Așa cum rezultă din (14.2) pentru a calcula $(\partial P / \partial E)$ este suficient să derivăm f_1 sau f_2 din partea dreaptă a ec.(14.2) se obține

$$M_l = \frac{\hbar^2}{2d^2}[\sin(ka)\sinh(k_l b) f_2 \frac{\partial f_1}{\partial E}]_{E=E^o}$$

pentru soluții pare și

$$M_l = \frac{\hbar^2}{2d^2}[\sin(ka)\sinh(k_l b) f_1 \frac{\partial f_2}{\partial E}]_{E=E^o}$$

pentru soluții impare. Substituind valorile lui f_1 și f_2 se obține următoarea expresie

$$M_l = \pm Q \frac{m \sinh(k_l b)}{k(a+b)C_a^2} \tag{14.5}$$

unde

$$Q = \gamma(M_{22}^2 + \sigma^2 M_{12}^2) + \gamma^{-1}[M_{11}^2 + (M_{21}/\sigma)^2] - 2(\sigma M_{11}M_{12} + \sigma^{-1}M_{21}M_{22})\cot ank_l b$$

$$C_a^2 = 2(a+b)\{a(1 \pm \frac{\sin ka}{ka}) + b(\frac{\sinh k_l b}{k_l b} \pm 1)\frac{1 \pm \cos ka}{\cosh k_l b \pm 1}[M_{11} - M_{12}\rho(\tanh \frac{k_l b}{2})^{\pm 1}]\}^{-1}$$

σ = lk, semnul superior și cel inferior se referă la stările pare și, respectiv, impare iar mărimile k, k_l, γ se determină la $E=E^o$,

$$k = (\frac{2m}{\hbar^2}E^o)^{1/2}; \qquad k_l = [\frac{2m_l}{\hbar^2}(U_o - E^o)]^{1/2}$$

Coeficienții C_a sunt conținuți în expresia funcției super-Bloch $u_o(x)$

$$u_o(x) = \begin{cases} C_a \cos k(x - x_a), \text{in} & \text{vai} \\ C_b \cosh k_l(x - x_b), \text{in} & \text{bariere} \end{cases}$$

pentru soluții pare și

$$u_o(x) = \begin{cases} C_a \sin k(x - x_a), \text{in} & \text{vai} \\ C_b \sinh k_l(x - x_b), \text{in} & \text{bariere} \end{cases}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

pentru soluţii impare. Pentru condiţiile de frontierã

$$F_A = F_B; \qquad \frac{1}{m}\frac{\partial F_A}{\partial x} = \frac{1}{m_1}\frac{\partial F_B}{\partial x} \tag{14.6}$$

şi condiţia de normare

$$\int_d u_o^2(x)dx = d$$

se obţine $M_{11}=M_{22}=1$, $M_{12}=M_{21}=0$ iar coeficienţii C_a^2, C_b^2 sunt daţi de expresiile

$$C_a^2 = 2(a+b)[a(1+\frac{\sin ka}{ka}) + b(1+\frac{\sinh k_1 b}{k_1 b})\frac{1+\cos ka}{1+\cosh k_1 b}]^{-1}$$

$$C_b^2 = \frac{1+\cos ka}{1+\cosh k_1 b}C_a^2$$

pentru soluţii pare cu $Q \to \gamma + \gamma^{-1}$. Pentru analiza spectrului la $K_x = \pm\pi/d$ în locul ec.(14.2) se utilizeazã ecuaţia echivalentã

$$1+\cos K_x d = \frac{1}{2}\sin(ka)\sinh(k_1 b)f_3 f_4$$

$$f_3 = -(M_{11} - M_{12}\coth\varphi_b)\tan\varphi_a + \gamma(M_{22}\coth\varphi_b - M_{21}\rho^{-1})$$

$$f_4 = \gamma^{-1}(M_{11} - M_{12}\rho\tanh\varphi_b)\cot an\varphi_a + M_{22}\tanh\varphi_b - M_{21}\rho^{-1}$$

Ecuaţia $f_3=0$ determinã energia electronului la frontierele zonei Brillouin într-o stare care este parã la reflexia faţã de centrul vãii şi imparã la reflexia faţã de centrul barierei. Ecuaţia $f_4=0$ corespunde stãrilor de la frontierele zonei Brillouin de paritate opusã. Pentru a calcula M_t (masa transversala) avem in vedere ca energia electronului $E_n(U_o)$ într-o superreţea cu energia potenţialã U_o la interfeţe,coincide cu energia

$$\frac{\hbar^2 K_t^2}{2m} + E_n(\tilde{U}_o)$$

unde $\tilde{K}_y = \tilde{K}_z = 0, \tilde{K}_x = K_x$

$$\tilde{U}_o = U_o + \frac{\hbar^2}{2}(\frac{1}{m} - \frac{1}{m_1})K_t^2$$

Prin urmare,

$$\frac{\hbar^2 K_t^2}{2M_t} = \frac{\hbar^2 K_t^2}{2m} - \frac{dE_n^o}{dU_o}\frac{\hbar^2}{2}(\frac{1}{m} - \frac{1}{m_1})K_t^2$$

sau

$$\frac{1}{M_t} = \frac{1}{m} + (\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m})\frac{dE_n^o}{dU_o} \tag{14.7}$$

Se ajunge la aceeaşi expresie dacã se mediazã inversul masei efective

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$\frac{1}{M_t} = \langle n,0|m^{-1}|n,0\rangle = \int u_o^2(x)[\frac{1}{m} + (\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m})\Theta_B(x)dx =$$
$$\frac{1}{m} + (\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m}) \langle n,0|\Theta_B|n,0\rangle \tag{14.8}$$

unde Θ_B=0 în valea cuanticã și Θ_B=1 în barierã. Din teoria perturbaţiilor se cunoaște cã variaţia înălţimii barierei de potenţial U_o cu dU_o determinã o variaţie a energiei E_n^o în primul ordin al lui dU_o datã de expresia

$$\delta E_n^0 = \delta U_o \langle n,0|\Theta_B|n,0\rangle \tag{14.9}$$

Din ultimele douã expresii se obţine (14.7). Utilizând condiţiile de frontierã (14.6) rezultã

$$\frac{\delta E_n^o}{\delta U_o} = \frac{1}{2}[\frac{\sinh k_1 b}{k_1 b} - (-1)^n \frac{b}{a+b} C_b^2$$

unde

$$C_b = \begin{cases} \frac{\cos\varphi_a}{\cosh\varphi_b} C_a & \text{pentru solutii pare} \\ -\frac{\sin\varphi_a}{\sinh\varphi_b} C_a & \text{pentru solutii impare} \end{cases}$$

Deoarece dE_n^o/dU_o variazã de la 0 la 1, valorile masei transversale se gãsesc între m și m_1. In Fig.3.24 se reprezintã dependenţa maselor longitudinalã și transversalã de perioada d a superreţelei din $GaAs/Al_{0,35}Ga_{0,65}As$ cu a=b. Parametrii utilizaţi în calcul au valorile $m=0,067m_o$, $m_1/m=1,43$ U_0=249meV. Calculul se referã la marginea inferioarã a celei mai de jos minibenzi. Calculãm în continuare masa efectivã în aproximaţia legãturii tari. Intr-o structurã cu bariere groase, în care $\exp(-k_1 b)<<1$, din (14.5) se obţine

$$M_1 \sim \frac{e^{k_1 b}}{(a+b)^2}$$

Utilizând condiţiile la limitã (14.6), coeficienţii L_i ai dezvoltãrii (14.1) sunt daţi de expresiile

$$\Lambda_1 = -\frac{\hbar^2}{8M_1}(\frac{\tilde{r}''}{\tilde{r}_o'}\frac{\hbar^2}{M_1} + \frac{d^2}{3})$$

$$\Lambda_2 = \frac{\hbar^2}{8}\frac{d^2E_o}{dU_o^2}(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m})$$

$$\Lambda_3 = \frac{\hbar^2}{4}(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m})\frac{d}{dU_o}(\frac{1}{M_1})$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde $\tilde{P}$ este partea dreaptă a ec.(14.2) iar $P' = \partial P / \partial E, P'' = \partial^2 P / \partial E^2$. Cu creșterea lui b raportul P'' / P' rămâne finit în timp ce M_1 crește nelimitat astfel că în cazul barierelor suficient de groase

$$\Lambda_1 = -\frac{\hbar^2 d^2}{24 M_1}$$

In acest caz limită, $\exp(-k_1 b) << 1$, se poate găsi din (14.2) nu numai coeficientul lui K_x^4 ci întreaga dependenţă $E(K_x)$. In acest scop păstrăm în partea dreaptă a ec.(14.2) primul termen din dezvoltarea în serie după puterile lui $E_n - E_n^\circ$ și nu dezvoltăm dupa puterile lui $K_x d$ partea stângă a acestei ecuaţii. Se obţine

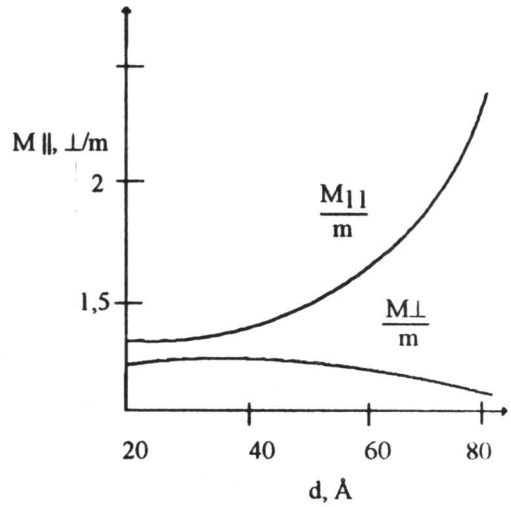


Fig. 3.24

$$E_n(K_x, K_t = 0) = E_n^\circ + \frac{\hbar^2}{M_1 d^2}(1 - \cos K_x d)$$

unde $$M_1 = \left(\frac{\hbar}{d}\right)^2 \left(\frac{\partial \tilde{r}}{\partial E_n}\right)_{E_n = E_n^\circ}$$

In acest caz lărgimea minibenzii după direcţia K_x este dată de expresia

$$\Delta = \frac{2\hbar^2}{|M_1| d^2} \tag{14.10}$$

In aproximaţia legăturii tari , când suprapunerea funcţiilor de undă $f_n(x)$ și $f_n(x \pm d)$ din văile adiacente este mică, funcţia de undă a electronului poate fi scrisă sub forma

$$\chi_n(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{K}_t \cdot \mathbf{r}_t}}{\sqrt{NS}} \sum_l f_n(x - ld) e^{iK_x ld}$$

unde N este numărul total de perioade din structură.In aproximaţia legăturii tari, lărgimea Δ a minibenzii pentru $m = m_1$ este dată de expresia

$$\Delta = 4U_o \int f_n(x) f_n(x+d) dx \tag{14.11}$$

Pentru soluţii pare se obţine

$$\Delta = 4U_o \left(\frac{C_a^2}{a+b}\right)_{b \to \infty} \cos\varphi_a e^{-k_1(b+a/2)} \int_{-a/2}^{a]2} \cos kx e^{-k_1 x} dx \tag{14.12}$$

Pentru k și k_1 corelaţi prin relaţia $k \tan\phi_a = k_1$ integrala (14.12) se reduce la

$$\frac{2k \sin\varphi_a}{k_1^2 + k^2} e^{k_1 a/2}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

astfel cã ec.(14.12) se reduce la ec.(14.10) deoarece pentru $m=m_l$ suma $k_l^2+k^2=2mU_o/\hbar^2$ și $\gamma+\gamma^{-1}=2/\sin ka$. Pentru $m\neq m_l$ se poate folosi în locul expresiei (14.1) o expresie mai generalã

$$\Delta = 4\int dx f_n(x)[U_o + \frac{\hbar^2}{2}(\frac{1}{m} - \frac{1}{m_l})\frac{d}{dx}\Theta_A(x)\frac{d}{dx}]f_n(x+d) \qquad (14.13)$$

deoarece în acest caz operatorii energie cineticã pentru straturi adiacente sunt diferiți între ei.$\Theta_A=1$ în valea cuanticã și $\Theta_A=0$ în barierã. Substituind în (13.16) pentru E_k funcția

$$\frac{\hbar^2 K_x^2}{2M_t} + \frac{\Delta}{2}(1-\cos K_x d)$$

se gãsește masa ciclotronicã în câmp magnetic $\mathbf{B}||y$ [20]

$$m_c(\varepsilon) = \frac{\hbar}{\pi}\sqrt{2M_t}\int_0^{K_o}\frac{dK_x}{\sqrt{\varepsilon - \frac{\Delta}{2}(1-\cos K_x d)}} = \frac{2\hbar}{\pi d}\sqrt{\frac{2M_t}{\varepsilon}}F(\arcsin\sqrt{\frac{E}{\Delta}},\sqrt{\frac{\Delta}{E}})$$

unde $\hat{U}=E-E_l^\circ$, $K_o=(2/d)\arcsin(\varepsilon/\Delta)^{1/2}$,$F(f,K)$ este integrala elipticã de ordinul întâi. Pentru $\varepsilon/\Delta<<1$, $F\approx(\pi/2)\sqrt{(\varepsilon/\Delta)}$ iar $m_{c,t}=(M_lM_t)^{1/2}$. In Fig. 3.25 se reprezintã rezultatele experimentale obținute pentru masa longitudinalã M_l (cerculețe) și pentru masa transversalã M_t (triunghiuri) în funcție de compoziția x într-o superrețea $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ cu a=8 nm, b=2 nm. Curbele care cuprind între ele ariile hașurate reprezintã $M_l(x)$ calculatã pentru o superrețea cu înălțimea barierei $U_o=0{,}65\Delta E_g$ (curba superioarã) și $U_o=0{,}61\Delta E_g$ (curba inferioarã). Aria hașuratã 1 este calculatã în modelul Kronig-Penney cu condițiile de frontierã

$$F_A = F_B; \qquad \left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_A = \left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_B$$

iar aria hașuratã 2 este calculatã în modelul Bastard în care condițiile de frontierã sunt[21]

$$F_A = F_B; \qquad \frac{1}{m}\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_A = \frac{1}{m_l}\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_B$$

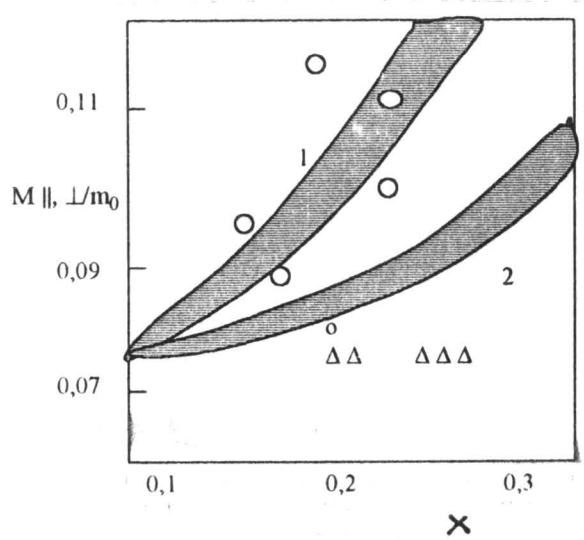


Fig. 3.25

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Bibliografie

1.Y.J.Mii, K.L.Wang,R.Karunsiri, P.Yuh, Appl.Phys.Lett. 56, 1046 (1990).

2 .Intersubband transitions in quantum wells, ed.E.Rosencher, B.Vinter, B. Levine, Plenum, New York, 1992.

3. S.Hunske, K.Leo, M.Kurz, K.K0hler, Phys.Rev. B49, 16525 (1994).

4. G.Wen,Y.Chang, Phys.Rev. B49, 16585(1994).

5. D.Reynolds, D.C.Look, B.Jogai,C.E.Stutz, Phys.Rev. B49, 11456 (1994).

6. A.I.Kucharska, D.J.Robbins, J.Quantum. Electron. QE-26, 443 (1990).

7. D.A.Broido, L. J. Sham, Phys. Rev. B31,888(1985)

8. R.H.Yan, S.W.Corzino, L.A.Coldren, IEEE J.Quantum.Electron.QE-26, 213(1990).

9.J.A.Manley, H.E.Rowe, Proc.IRE, 44,904(1956).

10. S.Schmitt-Rink, D.S.Chemla, D.A.B.Milter, Advances in Physics, 38, 89(1989).

11. Optical nonlinearities and instabilities in semiconductors, ed.H.Haug, Academic Press, 1988.

12. G.Bastard, E.E.Mendez, L.L.Chang, L.Esaki, Phys. Rev. B28, 3241 (1983).

13. K.Nishi, T.Hiroshima, Appl. Phys. Lett.51, 320(1983).

14. H.J.Polland, L.Shultens, J.Kihl, E.O.Gobel, C.W.Tsu, Phys.Rev.Lett. 55, 2610(1985).

15. P.Voisin, J .Bleuse, C.Bouche, S.Gaillard, C.Alibert, a.Regreny, Phys. Rev. Lett. 61, 1639 (1988).

16. J.Bleuse, G,Bastard, P.Voisin, Phys.Rev.Lett.60,2204(1988).

17. J.A.Trezza, M. morf, J.S.Hsrris, IEEE J. Quantum Electron.32, 53(1996).

18. E.L.Ivchenko,G.E.Pikus, Superlattices and other heterostructures, Solid-State Science 110, Springer Verlag, 1995.

19. M.A.Herman, D.Bimberg, J.Christen, J.Appl.Phys, 70, R1 (1991).

20. N.F. Goshimzade, E.L.Ivchenko, Fiz.Tekh. Polupr. 25, 323(1991), in ruseste.

21. T.Duffield et al, Phys. Rev. Lett. 56, 1724 (1986).

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Capitolul IV

Laseri și diode luminescente.

4.1. *Efectul laser*

Efectul laser în laserii cu semiconductori constă în amplificarea radiației prin stimularea tranziției electronilor din banda de conducție în banda de valență. Fenomenul are loc atunci când rata acestor tranziții depășește rata tranzițiilor inverse (din banda de valență în banda de conducție) ce au loc cu absorbție de radiație. Condiția esențială ce trebuie satisfăcută pentru aceasta este ca densitatea electronilor din banda de conducție să fie mai mare decât densitatea electronilor din banda de valență,adică să existe "inversia de populație". Intr-un semiconductor această relație se exprimă prin inegalitatea (3.7.7),

$$F_n - F_p > hn > E_g \qquad (1.1)$$

unde hν este energia fotonilor emiși iar F_n si F_p sunt cuasinivelele Fermi din banda de conducție și, respectiv, de valență. Cea mai simplă metoda de a obține inversie de populație într-un semiconductor este injecția într-o joncțiune p-n polarizată direct. Inversia de populație se realizează într-o regiune îngustă din jurul interfeței dintre straturile p și n ,numită regiune activă. Pentru a menține separarea nivelelor Fermi, astfel încât să fie satisfăcută condiția (1.1) este necesar să circule prin joncțiunea p-n un curent foarte mare (~30kA/cm^2, la temperatura camerei) deoarece o parte din purtătorii de sarcină liberi difuzează în afara planului joncțiunii unde nu mai este satisfăcută relația (1.1) și deci recombină fără a contribui la fenomenul de amplificare. Notăm că pentru a se obține amplificarea radiației este necesar ca radiația să fie coerentă în faza pentru ca densitatea de fotoni să fie mare, astfel încât rata de recombinare stimulată să depășescă rata de recombinare spontană. Datoritã densitãții mari de curent, laserii cu joncțiune p-n nu pot funcționa în curent continuu la temperatura camerei, ci numai la temperaturi joase (~200K). Această dificultate a fost depășită prin realizarea laserior cu heterojoncțiune dublă care constau dintr-un strat activ îngust (~200 nm) construit dintr-un material cu banda interzisă

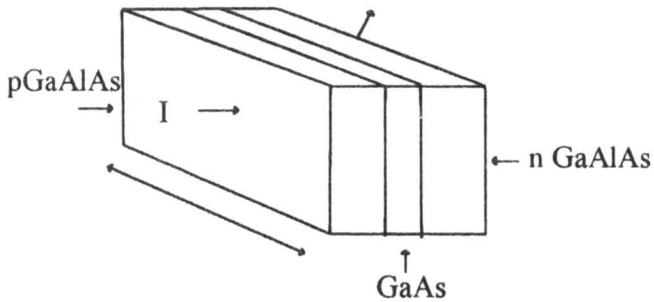


Fig. 4.1

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

îngustă,de exemplu GaAs, cuprins între două straturi p și n cu banda interzisă mai largă, de exemplu din AlGaAs (Fig.4.1). Așa cum se observă în Fig.4.2 la polarizare directă, electronii și golurile injectate,sunt confinate în regiunea activă, astfel că inversia de populație se realizează în toată această regiune și numai o mică parte din purtătorii injectați se pierde în exteriorul ei.In plus, regiunea activă are indice de refracție $\bar{n}$ mult mai mare decât regiunile adiacente (deoarece acestea din urmă au banda interzisă mai mare decât regiunea activă) așa cum se reprezintă în Fig.4.2. Astfel, stratul activ servește și ca ghid de undă optic, radiația emisă fiind confinată în această zonă, ceea ce conduce la creșterea amplificării.

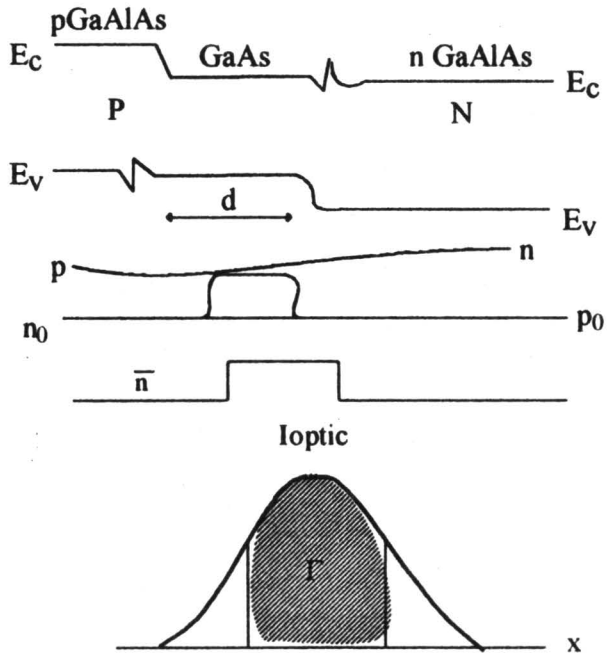


Fig. 4.2

Aceste două efecte, confinarea purtătorilor de sarcină și confinarea radiației, în regiunea activă conduc la micșorarea curentului de prag de 100 ori față de cazul joncțiunii p-n [1]. Pentru determinarea curentului de prag trebuie cunoscute două relații:condiția de prag și relația dintre densitatea de curent de prag și amplificare.S tratul activ se comportă ca o cavitate Fabry-Perot. Oglinzile de la capetele cavității reflectă o parte din lumină (generată inițial prin emisie spontană) înapoi în interiorul regiunii active unde aceasta este amplificată. Suprafețele 1 și 2 ale cavității au coeficienții de reflexie R_1 si R_2. Suprafețele reflectante sunt plan-paralele și distanța dintre ele este L. Condiția de prag cere ca intensitatea radiației I_o să rămână neschimbată după ce parcurge distanța 2L în interiorul cavității.

$$I_o R_1 R_2 \exp[2\Gamma g_p L]\exp[-2L(\Gamma\alpha_i+(1-\Gamma)\alpha_c)]=I_o \qquad (1.2)$$

unde g_p este coeficientul de amplificare la prag pe unitatea de lungime în regiunea activă, Γ este factorul de confinare optică, α_i este coeficientul de pierderi interne în stratul activ, iar α_c este coeficientul de pierderi în straturile de confinare a radiației pe unitatea de lungime.Relația (1.2) mai poate fi scrisă sub forma

$$\Gamma g_p = \Gamma\alpha_i + (1-\Gamma)\alpha_c + \frac{1}{2L}\log\frac{1}{R_1 R_2} \qquad (1.3)$$

Factorul Γ de confinare optică este definit de expresia

$$\Gamma = \frac{\int_{-d/2}^{d/2} |F(x)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |F(x)|^2 dx} \qquad (1.4)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde F este intensitatea câmpului electric al radiației. Γ reprezintă fracțiunea din fotonii aparținând undei ghidate optic care interacționează cu materialul activ. Amplificarea pe uitatea de lungime nu este g ci Γg, pierderile în regiunea activă sunt $\Gamma\alpha_i$ iar pierderile în afara regiunii active sunt $(1-\Gamma)\alpha_c$. Pentru micșorarea densității de curent de prag (valoare la care se atinge g_p) este de dorit să se micșoreze lărgimea d a regiunii active. Dar atunci când această lărgime devine mai mică decât ~200 nm (~ lungimea de undă a radiației emise în semiconductor) câmpul optic nu mai poate fi confinat suficient, astfel că Γ scade și crește g_p și curentul de prag. Pentru a menține o lărgime d optimă a lărgimii active și a mări lărgimea regiunii de ghidare a radiației, se utilizează laserul cu confinare separată, reprezentat în Fig.4.3. Confinarea separată este posibilă deoarece pentru confinarea purtătorilor este suficientă o diferență mai mică între benzile interzise (și deci un salt de potențial mai mic) decât pentru confinarea radiației (rezultată din saltul indicelui de refracție). Acest laser este construit astfel:regiunea cu banda îngustă (GaAs) se află situată între două regiuni $Al_yGa_{1-y}As$ cu banda interzisă puțin mai mare decât GaAs, care la rândul lor sunt mărginite de două regiuni $Al_xGa_{1-x}As$ cu banda interzisă și mai mare. Asemenea structuri pot fi N_x-N_y-p-P_y-P_x sau N_x-N_y-n-P_y-P_x, de exemplu: p^+GaAs-$p^+Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ (0,5mm)-$pAl_{0,1}Ga_{0,9}As$ (0,45mm)-pGaAs (0,15mm)-$nAl_{0,1}Ga_{0,9}As$ (0,45mm)-$nAl_{0,3}Ga_{0,7}As$. In laserul cu confinare separată factorul este mai mare decât în laserul cu heterojoncțiune dublă. Un caz interesant de laser cu confinare separată este cel în care regiunea activă este o vale cuantică de potențial de lărgime mai mică decât 30 nm (Fig.4.4). In valea cuantică de potențial energia fotonilor emiși este mai mare decât în materialul masiv și este controlată de lărgimea d a văii cuantice. Lărgimea liniei de emisie este mai îngustă astfel că, pentru aceeași valoare a amplificării maxime, densitatea de curent de prag este mai mică decât în cazul semiconductorului masiv.In asemenea structuri densitatea de curent de prag s-a micșorat până la $100A/cm^2$. S-au realizat și laseri cu confinare laterală atât a purtătorilor de sarcină cât și a radiației. Pentru a înțelege construcția unui asemenea laser reprezentăm în Fig.4.5a un laser cu geometrie de bandă (stripe). După creșterea heterojoncțiunii duble (care are regiunea activă pGaAs), peste ultimul strat, stratul de contact p^+GaAs, se crește un strat de oxid. In acesta se decupează o bandă de lățime 50 mm (lățimea structurii este 300 mm) de

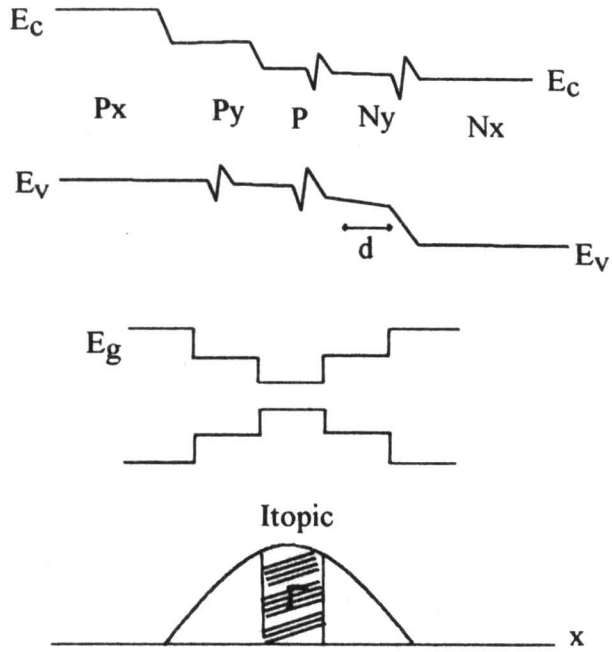


Fig. 4.3

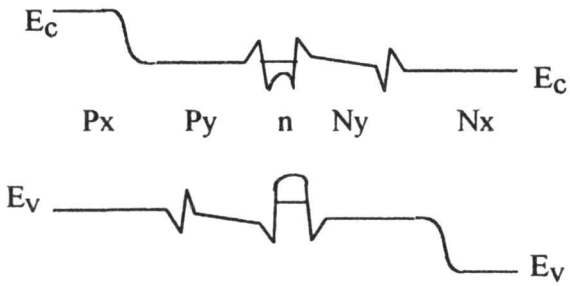


Fig. 4.4

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

oxid și se depune stratul metalic de contact ohmic. Prin urmare, contactul metalic nu este depus pe întreaga suprafață a structurii ci numai pe o bandă îngustă ,ceea ce limitează curentul total prin structură. Purtătorii de sarcină injectați care difuzează lateral față de zona situată sub banda metalică nu aduc contribuție la efectul laser, deoarece condiția de inversie de populație este satisfăcută numai în regiunea de sub această bandă. Insă, prin gravarea zonelor laterale și recreșterea în locul acestora a unui strat de nAlGaAs se obține o heterojoncțiune dublă laterală cu confinare optică (și a purtătorilor de sarcină) laterală, așa cum se reprezintă în Fig.4.5b. Aceasta se mai numește și heterostructură ascunsă (în literatura străină "buried heterostructure, BH"). Din combinarea acestui tip de heterostructură cu o heterostructură cu vale cuantică cu confinare separată se obține un laser cu un curent de prag mai mic decât 1 mA.

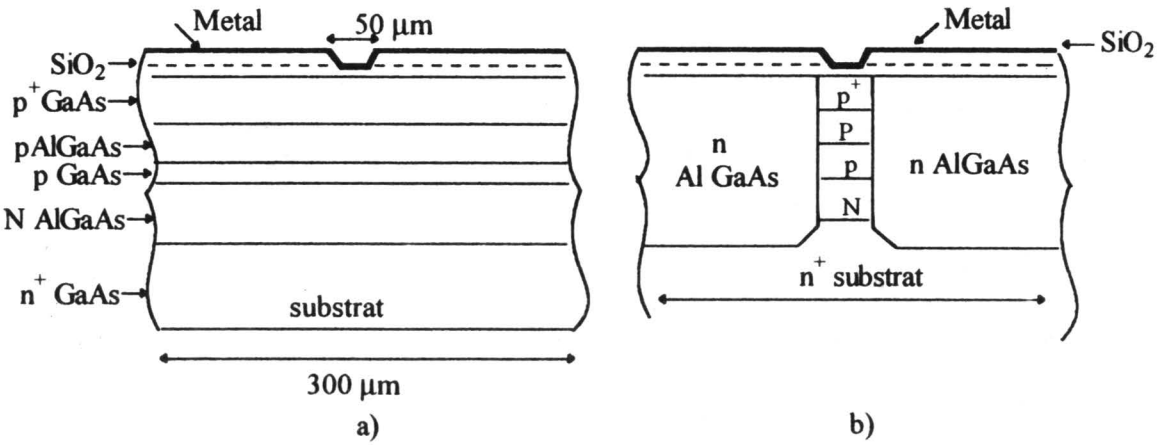


Fig. 4.5

4.2. *Curentul de prag în laserul cu heterojoncțiune dublă*

La prag,procesele de recombinare sunt încă dominate de recombinarea spontană, astfel că densitatea de curent de prag j_p poate fi considerată ca fiind densitatea de curent de recombinare spontană care trece prin structura atunci când separarea cuasinivelelor Fermi, ΔF, ale electronilor și golurilor este astfel încât valoarea maximă a amplificării, g_{max}, este egală cu valoarea de prag g_p, dată de relația (1.3). Curentul j_{spon} este dat de expresia

$$j_{spon}(\Delta F) = q\int R_{spon}(\Delta F, \hbar\omega)d(\hbar\omega), \quad A/cm^3 \qquad (2.1)$$

unde R_{spon} este rata de emisie spontană spectrală (fotoni/cm^3 se.eV) dată de relația (3.6.4).Se calculează o serie de curbe spectrale ale amplificării pentru diverse valori ale separării ΔF, apoi se construiește graficul g_{max} (ΔF) (valorile maxime ale amplificării din fiecare curbă spectrală) în funcție de densitatea de curent de recombinare spontană j_{spon}(DF) corespunzătoare aceleiași valori ΔF. Dintr-o asemenea curbă, reprezentată în Fig.4.6 pentru GaAs masiv, se găsește valoarea curentuui de recombinare spontană de prag pentru aceeași valoare a lui g_{max}[2]. Densitatea de curent la care g_{max}=0 se notează cu j_o și se numește densitate de curent de transparență; ea corespunde condiției $\Delta F=F_n-F_p=h\nu_o$ unde $h\nu_o$ este cea mai joasă energie pentru tranziția optică în material ($\approx E_g$). Curentul de transparență depinde de

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

densitatea de stări și de rata de tranziție bandă-bandă. Dacă scade rata de tranziție scade atât amplificarea cât și curentul. Relația amplificare -curent este controlată de doi factori esențiali: lărgimea spectrului de emisie spontană și lungimea de undă a laserului [3]. Deoarece laserul funcționează pe o anumită lungime de undă, curentul corespunzător celorlalte lungimi de undă din spectrul de emisie este un curent de pierdere.Cu cât este mai larg spectrul de emisie spontană cu atât este mai mare curentul care trece prin structură pentru o anumită separare a cuasinivelelor Fermi. Din relația (2.1) rezultă că în laserul cu heterojoncțiune dublă curentul de recombinare spontană j_{spon} ,necesar pentru a menține o anumită separare DF a cuasinivelelor Fermi (și prin urmare o anumită densitate a purtătorilor de sarcină și o anumită valoare a amplificării) este proporțional cu volumul regiunii active și se poate scrie [4]

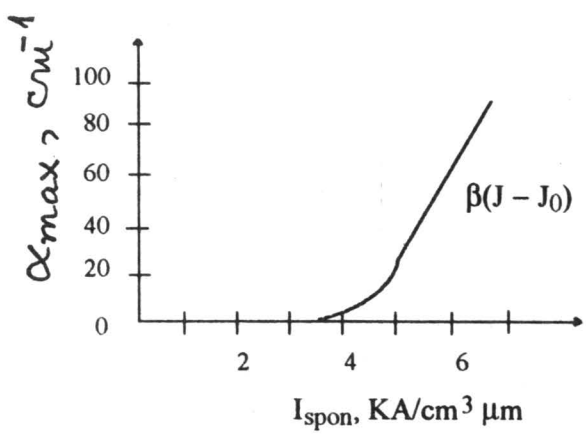


Fig. 4.6

$$g_{max}=\beta(J_{spon}-J_o) \tag{2.2}$$

unde β=0,04 cm^{-1} (Acm^{-2}mm^{-1})$^{-1}$ în GaAs iar J_o este egal aproximativ cu densitatea de curent de transparență. J_{spon} este dat de ec.(2.1) iar g_p este dat de ec.(1.3). Menționăm că la amplificare foarte mică g_{max} depinde de $(J_s-J_o)^2$. Notând lungimea cavității cu L, grosimea regiunii active cu d și cu w lățimea regiunii în care are loc amplificarea radiției se poate scrie

$$\frac{I_p}{Lw}=J_p=\frac{d}{\eta}J_{sp} \tag{2.3}$$

unde I_p este curentul total, la prag, ce trece prin structură, J_p este densitatea de curent de prag,J_{sp} este densitatea de curent de recombinare la prag (raportată la unitatea de volum) iar η este eficiența internă la injecție mare. Relația (2.3) a fost scrisă având în vedere că la prag recombinarea spontană este încă mecanismul dominant. Eficiența internă a luminescenței este dată de expresia

$$\eta=\frac{R_s}{R_s+R_n+2(R_i+R_i')}=\frac{\tau_{ef}}{\tau_r} \tag{2.4}$$

unde R_s este rata de recombinare radiantă spontană, R_n este rata de recombinare neradiantă în regiunea activă (recombinare neradiantă via nivele locale), R_i este rata de recombinare la suprafață (ea are loc via stările de interfață), R'_i este rata de recombinare via stările adânci din volumul materialului cu banda interzisă largă ce sunt foarte apropiate de interfață (această rată nu poate fi distinsă de R_i). Timpul de viață efectiv, τ_{ef} este dat de expresia

$$\frac{1}{\tau_{ef}}=\frac{1}{\tau_r}+\frac{1}{\tau_{nr}}+\frac{2s}{d} \tag{2}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde

$$\frac{1}{\tau_r}=\frac{R_s}{\Delta n};\qquad \frac{1}{\tau_{nr}}=\frac{R_n}{\Delta n};\qquad \frac{2(R_i+R_i')}{\Delta n}=\frac{2s}{d}$$

$\Delta n=\Delta p$ este concentraţia purtătorilor de sarcină injectaţi.In semiconductorul masiv τ_r se poate determina cunoscând concentraţia de dopare din semiconductor. Pentru un semiconductor de tip p se poate scrie [5,6]

$$\frac{1}{\tau_r}=Bp_o \tag{2.6}$$

unde B este coeficientul de recombinare radiantă iar p_o este concentraţia de dopare;se consideră $p_o>>\Delta n$. In GaAs slab dopat, $p_o=10^{16}cm^{-3}$, se obţine $\tau_r\approx500$ ns. Timpul de recombinare neradiantă via capcane este dat de expresia [6]

$$\frac{1}{\tau_{nr}}=\frac{R_n}{\Delta n}=N_tS_n<v>$$

unde N_t este concentraţia capcanelor,S_n este secţiunea de captură a electronilor pe aceste capcane iar <v> este viteza medie termică a electronilor. Pentru $N_t=10^{15}cm^{-3}$. $S_n=10^{-15}cm^2$ se obţine la tremperatura camerei $\tau_{nr}=100$ ns. Pentru d=0,5 mm şi $s=10^3cm/s$ se obţine 2d/s=25 ns. Din ec. (2.5) rezultă că la nivel mic de injecţie τ_{ef} este determinat de procesele de recombinare neradiantă (de volum şi de suprafaţă) si $\eta=0.05$. Din dependenţa $1/\tau_{ef}=f(1/d)$ se poate determina viteza de recombinare la suprafaţă s. Mărimea τ_r se poate determina din ec.(2.6) cunoscându-se concentraţia impurităţilor de dopare. Pentru a se micşora viteza de recombinare la suprafaţă se iau măsuri de optimizare a procesului de creştere;se poate ajunge în acest fel la o valoare s=18 cm/s [7].La prag concentraţiile purtătorilor de sarcină în regiunea activă sunt mari ($n=p\sim10^{18}cm^{-3}$) şi timpul de recombinare radiantă τ_r se micşorează la 5 ns. In acest caz, dacă timpul de recombinare neradiantă şi viteza de recombinare la suprafaţă rămân neschimbate, adică au valorile din cazul nivelului mic de injecţie,estimate mai sus, procesul derecombinare radiantă este dominat de densitatea de curent $J_s=qn/\tau_r=3.10^3$ A/cm^2.mm. Desigur că procesele de recombinare neradiantă se pot modifica cu modificarea nivelului de injecţie deoarece modificarea separării cuasinivelelor Fermi modifică ocuparea cu electroni a stărilor locale din volum şi de la suprafaţă. Din dependenţa de temperatură a lui τ_{ef} se poate discerne între diversele mecanisme de recombinare [8]. Pentru a găsi dependenţa de lărgimea d, a regiunii active, a curentului de prag J_p rescriem ecuaţia (1.3) sub forma

$$g_p=\frac{1}{\Gamma}G \tag{2.7}$$

unde

$$G=\alpha+\frac{1}{L_c}\ln\frac{1}{R} \tag{2.8}$$

unde am notat $\Gamma\alpha=\alpha_i\Gamma+\alpha_\chi(1-\Gamma)$ şi L_c este lungimea cavităţii.Din ec.(2.2),(2.3),(2.7) şi (2.8) rezultă

$$J_p=\frac{d}{\eta}\left[\frac{G}{\Gamma\beta}+J_o\right] \tag{2.9}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde am notat $g_{max}=g_p$ .Dependența de d a lui J_p depinde de dependența de d a lui Γ. In fig.4.7 se reprezintă dependența lui Γ de d pentru o structură cu heterojoncțiune dublă (curba 1) și pentru o structură cu confinare separată cu lărgimea ghidului de confinare de 200 nm [9]. Structurile sunt construite din GaAs/AlGaAs. Așa cum reiese din figură, în laserul cu hterostructură dublă, la valori mari ale lui d, confinarea Γ≈1, este constantă, și J_p~d.Pentru o structură cu L_c=250 mm, a=10 cm^{-1}, R=0,3 se obține G≈60 cm^{-1}. In GaAs J_o≈4.10^3A/cm^2mm și b=0,04 cm^{-1} $(Acm^{-2}mm^{-1})^1$, astfel că se obține

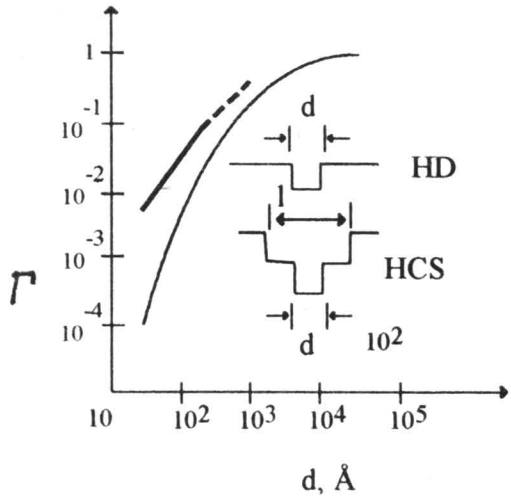


Fig. 4.7

$$J_p \approx \frac{d}{\eta}[1500+4000], A/cm^2$$

In relația (2.9) în acest caz este dominant termenul J_o.Pentru d=2 mm, η=1 se obține J_p=1,1.10^4A/cm^2. In laserul cu heterojoncțiune dublă, cu scăderea lui d confinarea scade aproximativ proporțional cu d^2 (Fig.4.7) astfel că în ec.(2.9) devine dominant primul termen din interiorul parantezelor. Notând $\Gamma=\Gamma_o\delta^2$,ec.(2.9) devine, la valori mici ale lui d,

$$J_p = \frac{G}{\eta\Gamma_o\beta}\frac{1}{d} + \frac{J_o}{\eta}d \qquad (2.10)$$

Dependența lui J_p de d în laserul din GaAs cu η=1 este reprezentată în Fig.4.8. Curba 1 este pentru laserul cu heterostructură dublă.Pe aceeași figură este reprezentată cu linie întreruptă pierderea optică Gd/βΓ, primul termen din ec.(2.9) si (2.10) și de asemenea, cu linie-punct este reprezenat curentul de transparență J_od (pentru η=1) care reprezintă cel de al doilea termen din aceste relații. Compunerea celor doi termeni da J_p. Pe aceeași figură sunt notate cu 2 curbele reprezentând curentul de prag J_p pentru structura cu heterojoncțiuni, cu confinare separată,ce are lățimea ghidului de confinare w=200 nm. In cazul laserului cu heterojoncțiuni cu confinare separată ,așa cum reiese din Fig.4.7 se poate scrie $\Gamma=\Gamma'_o d$ astfel că se obține pentru curentul de prag expresia

$$J_p = \frac{G}{\eta\Gamma'_o\beta} + \frac{J_o}{\eta}d \qquad (2.11)$$

La valori mici ale lui d, J_p tinde către o valoare constantă. Pentru Γ'_o =3mm^{-1} se obține în cazul d → 0

$$J_p \to \frac{G}{\eta\Gamma'_o\beta} = \frac{60}{1\times 3\times 0{,}04} = 500A/cm^2$$

unde am considerat G = 60 cm^{-1}. Pentru a obține dependența densității curentului de prag de lungimea L a cavității substituim expresia (2.8) a lui G în ec.(2.9)

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$J_p = \frac{1}{L}\frac{d}{\eta\Gamma\beta}\ln(1/R) + \frac{d}{\eta}[\frac{\alpha}{\Gamma\beta} + J_o] \qquad (2.12)$$

Cu creşterea lui L creşte amplificarea pe unitatea de lungime şi scade J_p.Graficul $J_p = f(1/L)$ este o linie dreaptă. Scriem în continuare expresia curentului total de prag

$$I_p = w\frac{d}{\eta\Gamma\beta}\ln(1/R) + \frac{dw}{\eta}[\frac{\alpha}{\Gamma\beta} + J_o]L \qquad (2.13)$$

Această relaţie arată că I_p creşte monoton cu L şi deci curentul total de prag are valoare mai mică la L mai mic deşi densitatea de curent de prag are valoare mai mare.Valoarea lui I_p la L foarte mic corespunde curentului necesar pentru a compensa numai pierderile de la capetele cavităţii, adică cele date de primul termen din ec.(2.13). Dependenţa de temperatură a curentului de prag J_p este determinată de dependenţa de temperatură a curentului de recombinare spontană J_{sp} necesar pentru a obţine aceeaşi valoare maximă a amplificării g_{max} (valoarea maximă a amplificării în funcţie de hν). Cu scăderea temperaturii se micşorează lărgimea distribuţiei după energie a purtătorilor de sarcină generaţi termic şi deci se micşorează lărgimea spectrului de emisie şi al amplificării. Ca urmare, scade J_{sp}.Pentru g_{max} constant dependenţa de temperatură a lui J_{sp} este determinată de dependenţa de temperatură a densităţii efective de stări şi a coeficientului de recombinare radiantă ceea ce dă $J_p \sim T^{3/2}$. Alte contribuţii la dependenţa de temperatură a lui J_p le aduc dependenţa de temperatură a lui η şi dependenţa de temperatură a curentului de scurgere din afara regiunii active.Acesta din urmă depinde de temperatură ca $\exp(\Delta E_g/kT)$ unde ΔE_g este înălţimea barierei de confinare; de aceea alegerea materialelor care alcătuiesc heterojoncţiunea poate avea o influenţă determinantă asupra dependenţei de temperatură a lui J_p. Experimental, s-a găsit că J_p depinde exponenţial de temperatură după relaţia

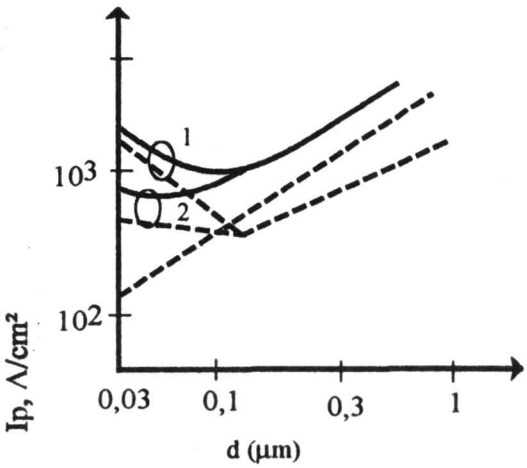


Fig. 4.8

$$\frac{J_p(T_2)}{J_p(T_1)} = \exp(\frac{T_2 - T_1}{T_o}) \qquad (2.14)$$

unde T_o este o temperatură caracteristică. Pentru $(T_2-T_1) \ll T_1$ se obţine

$J_p \sim T^{3/2}, T_o \approx 2T_1/3 = 2.300/3 = 200K$ pentru $T_1 = 300K$.

4.3. *Laserul cu vale cuantică de potenţial.*

In valea cuantică de potenţial nivelele de energie ale electronilor şi golurilor sunt cuantificate.Efectul laser are loc la energii determinate de lărgimea benzii interzise 2D care diferă de lărgimea benzii interzise 3D datorită confinării electronilor şi golurilor. O contribuţie

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

importantă la poziţia nivelelor de energie o aduce interacţiunea Coulomb. Densitatea de stări 2D este constantă (nu depinde de energie) şi maximul amplificării are loc la marginea inferioară a benzii 2D pe când în cazul 3D purtătorii injectaţi deplasează maximul lui g la energii mai mari decât marginea inferioară a benzii. Ca urmare, amplificarea $g_{max}=\beta(J-J_o)$ are o pantă mai mare în cazul 2D decât în cazul 3D. In Fig.4.9 se reprezintă structura de benzi de energie, amplificarea în funcţie de energie pentru trei valori ale concentraţiei purtătorilor injectaţi precum şi dependenţa lui g_{max} de concentraţia purtătorilor injectaţi în cazul 3D (partea stângă) şi în cazul 2D (partea dreaptă) [10]. In cazul 2D amplificarea maximă se saturează la o valoare finită a curentului de injecţie când stările de energie se umplu complet cu purtători de sarcină. In cazul 3D densitatea de stări creşte cu energia şi nu are loc o saturare a lui g_{max}. Densitatea de curent de transparenţă J_o în cazul 2D este mult mai mică decât în cazul 3D deoarece densitatea de stări în primul caz este mult mai mică. De exemplu, în intervalul de energie kT în valea cuantică de potenţial din GaAs există 10^{12} stări pe cm^2 pe când într-un laser cu heterojoncţiune dublă cu d=100 nm există 10^{13} stări pe cm^2.Factorul de confinare optică Γ are valoare optimă în structura cu confinare optică separată şi nu depinde în acest caz de lărgimea văii cuantice. In acest paragraf vom face o trecere în revistă a rezultatelor obţinute în cap.III relativ la amplificarea radiaţiei în laseri şi a curentului datorat recombinării radiante spontane, într-un caz simplificat. In cazul tranziţiei de dipol, electron-gol, în valea cuantică de potenţial am făcut următoarele presupuneri: (1) Există o simetrie de translaţie în planul (y,z) al joncţiunii astfel că vectorul de undă paralel cu joncţiunea,al electronului se conservă, adică $\Delta k_t=0$; (2) Funcţiile de undă ale electronilor şi golurilor sunt ortogonale între ele astfel că sunt permise numai tranziţiile cu $\Delta n=0$, adică între un nivel din banda de conducţie şi un nivel din banda de valenţă care au acelaşi număr cuantic. Neglijăm suprapunerea funcţiilor de undă aparţinând celor două benzi. In modelul simplificat pe care-l discutăm în cele ce urmează, neglijăm următoarele efecte: (1) lărgirea spectrului de energie datorită împrăştierii intrabandă a purtătorilor de sarcină injectaţi; (2) efectele polarizării asupra tranziţiilor stimulate, datorate anizotropiei văii cuantice.Aceste efecte le vom studia în detaliu în paragraful următor. In valea cuantică de potenţial gazul de electroni este bidimensional (2D). Dacă lărgimea văii cuantice este orientată în direcţia x, mişcarea electronilor este cuantificată în această direcţie, iar în planul (y,z) mişcarea acestora este liberă. Energia în direcţia k_x este cuantificată. Fiecare nivel de energie în direcţia k_x formează o subbandă în direcţiile k_y.k_z; în aceste două direcţii mişcarea electronului este liberă. Densitatea de stări de energie este suma din densităţile de stări corespunzătoare fiecărei subbenzi (ec.2.1.21)

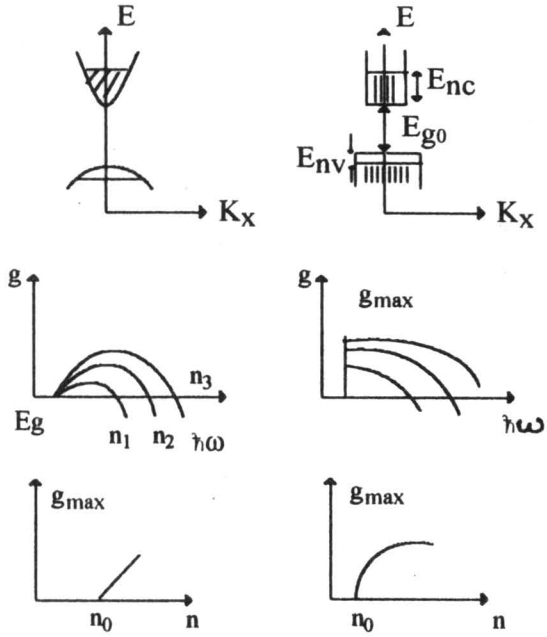


Fig. 4.9

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$\rho_{2D} = \frac{m}{\pi\hbar^2 L_x} \sum_{E_{n_x}} \Theta(E - E_{n_x})$$

Deoarece conține la numitor lărgimea văii cuantice L_x ,denitatea de stări este raportată la unitatea de volum. Amplificarea este dată de expresia (3.7.6)

$$g(\hbar\omega) = g_o(\hbar\omega)|M_T|^2 \sum_{n_c n_v} \rho(\hbar\omega - E_g)(f_c - f_v) \qquad (3.10)$$

unde $$g_o(\hbar\omega) = \frac{1}{\hbar\omega} \frac{\pi q^2 \hbar \bar{n}}{\varepsilon c m^2}$$

m este masa electronului liber,$|M_T|$ este valoarea medie a elementului de matrice al impulsului dat de expresia generală (3.8.4) care în semiconductorul masiv nu depinde de polarizarea luminii și are aceeași valoare ca în cazul tranziției dintr-o subbandă de conducție în subbanda de valență separată datorită despicării spin-orbită (ec.3.8.6)

$$|M_T|^2 = \frac{2}{3}|M|^2$$

unde $|M|^2$ este dat de relația (3.8.9)

$$|M|^2 = (\frac{m}{m^*} - 1)\frac{E_g + \Delta}{2(E_g + \frac{2}{3}\Delta)} m E_g \qquad (3.2)$$

n_c reprezintă numărul cuantic al subbenzii de conducție ,n_v reprezintă numărul cuantic al subbenzii de valență,subbenzi între care au loc tranzițiile. $\rho(\hbar\omega - E_g)$ este densitatea de stări redusă

$$\rho(\hbar\omega - E_g) = \frac{m_r}{\pi\hbar^2}\frac{1}{L_x}\Theta(\hbar\omega - E_g); \qquad E_g = E_{go} + E_{n_c} + E_{n_v}; \quad \frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v} \qquad (3.3)$$

unde E_{go} este lărgimea benzii interzise din semiconductorul masiv iar E_{nc},E_{nv} sunt energiile subbenzilor (cuantificate în direcția k_x) din banda de conducție și, respectiv, de valență ,definite în Fig.4.9. f_c este funcția de distribuție Fermi-Dirac a electronilor în subbanda de conducție iar f_v este funcția de distribuție a electronilor în subbanda de valență. Concentrațiile purtătorilor de sarcină în cele două subbenzi sunt date de expresiile (3.7.8)-(3.7.10). Rata de recombinare spontană este dată de expresia (3.6.4) pe care o sumăm peste numerele cuantice n_c și n_v,

$$R_{sp}(\hbar\omega) = R_o(\hbar\omega)|M_T|^2 \sum_{n_c}\sum_{n_v} \rho(\hbar\omega - E_g) f_c(1 - f_v)$$

$$R_o(\hbar\omega) = \frac{q^2 \bar{n} \hbar\omega}{\pi m^2 \hbar^2 c^3 \varepsilon_o} \qquad (3.4)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde am ţinut cont de expresia (3.6.5).Pentru a găsi relaţia dintre densitatea de curent şi valoarea spectrală maximă a amplificării se scrie componenta radiantă a curentului în laserul cu vale cuantică de potenţial integrând peste rata de emisie spontană spectrală

$$J_{rs} = L_x q \int_{E_g}^{E_{g,b}} R_{sp}(E)dE \qquad (3.5)$$

Integrarea se efectuează numai pe tranziţiile care implică numai stări ale văii cunatice de potenţial cu limita inferioară a benzii efective interzise a văii cuantice (definită în ec.(3.3) pentru $n_c=n_v=1$) şi limita superioară $E_{g,b}$, lărgimea benzii interzise în bariera de potenţial. Tranziţiile la energii mai mari decat $E_{g,b}$ sunt considerate pierderi,nedorite. In expresia de mai sus am scris în loc de hν energia E. Daca avem un laser cu N văi cuantice de potenţial atunci curentul de recombinare spontană este dat de expresia (3.5) înmulţită cu N

$$J_{rs,N}=NJ_{rs} \qquad (3.6)$$

4.4. *Lărgirea liniei spectrale de emisie datorită relaxării intrabandă a purtătorior de sarcină.*

In paragraful anterior am prezentat amplificarea g(E) şi rata de recombinare spontană $R_{sp}(E)$ într-un model simplificat,în cadrul căruia am ignorat efectele care conduc la lărgirea spectrului de emisie precum şi efectele polarizării datorită anizotropiei văii cuantice. Deoarece în valea cuantică densitatea de stări este funcţia treaptă spectrele g(E) şi $R_{sp}(E)$ ar trebui să prezinte trepte abrupte.Insă experimental se observă o lărgire a acestor spectre. Cel mai important mecanism care determină această lărgire este relaxarea intrabandă a purtătorilor de sarcină datorită fenomenelor de împrăştiere (coliziune), deoarece timpul mediu între două coliziuni succesive este foarte scurt; în GaAs şi InAs este de ordinul a 0,1 ps. Pe lângă efectul de lărgire are loc şi un efect de micşorare a maximului intensităţii de emisie şi o deplasare a acestuia. Pentru determinarea curentului de prag într-un laser este necesar să cunoaştem valoarea picului (maximului) amplificării, nu şi poziţia sa sau alte detalii asupra spectrului amplificării. De

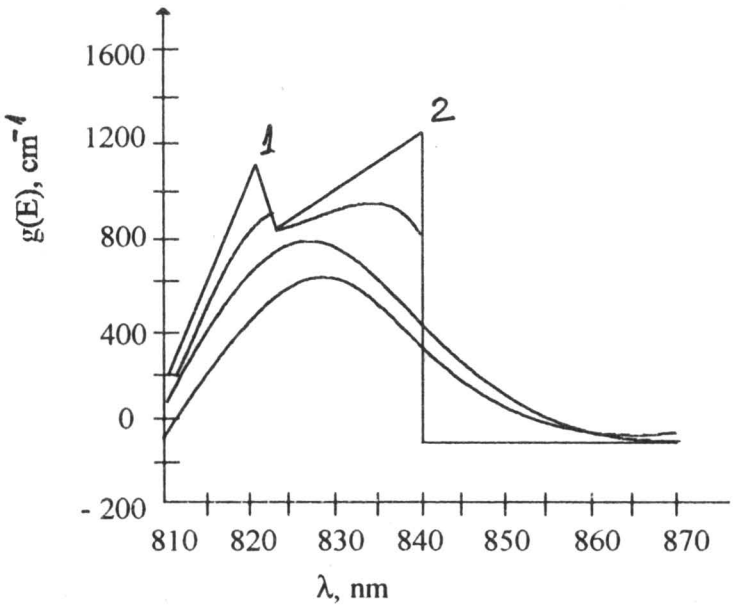


Fig. 4.10

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

aceea în cele ce urmează vom descrie un model simplificat al relaxării intrabandă pentru a estima influenţa sa asupra maximului amplificării.Elementul de matrice al tranziţiei rămâne în acest caz independent de energie. In modelul de relaxare intrabandă se iau în considerare coliziunile electron-electron, electron-fonon şi electron-impuritate. In mod similar se iau în considerare coliziunile golurilor. Se presupune că fiecare stare energetică la o valoare dată a lui **k** este lărgită în mod omogen de către procesele de relaxare intrabandă a purtătorior de sarcină, formând o linie de formă Lorentziană pentru fiecare stare. Lărgimea liniei se determină din timpul de coliziune a purtătorilor şi este independentă de energie. Tranziţiile optice între stările lui **k**, lărgite energetic, din benzile de conducţie şi de valenţă satisfac legea conservării vectorului de undă **k**. Lărgirea stărilor de energie poate fi considerată ca o violare a principiului conservării energiei de către principiul de incertitudine. Dacă nu luăm în considerare această lărgire, numărul de electroni pe interval de energie unitate şi pe unitatea de volum, cu energia E' deasupra marginii inferioare a benzii de conducţie în semiconductorul masiv este $n(E')=2\rho_c(E')f_c(E')$ unde $\rho_c(E')$ este densitatea de stări şi $f_c(E')$ este funcţia de distribuţie Fermi-Dirac. Dacă se ia în considerare lărgirea datorată relaxării atunci numărul efectiv de electroni de energie E' este

$$n(E') = 2\int_{-\infty}^{\infty} \rho_c(\overline{E}) f_c(\overline{E}) L_c(E' - \overline{E}) d\overline{E} \tag{4.1}$$

unde

$$L_c(E' - E) = \frac{\delta E_c}{2\pi} \frac{1}{(E' - \overline{E})^2 + (\frac{\delta E_2}{2})^2} \tag{4.2}$$

este funcţia Lorentziană valabilă când $\delta E_c \ll E'$, adică

$$\int_{-\infty}^{\infty} L_c(E' - \overline{E}) d\overline{E} = 1 \tag{4.3}$$

Lărgirea δE_c a liniei este dată de expresia

$$\delta E_c = \frac{\hbar}{\tau_c} \tag{4.4}$$

unde τ_c este timpul de coliziune intrabandă sau timpul de relaxare al unui electron din banda de conducţie.Din considerente de simetrie matematică s-au luat limitele de la $-\infty$ la ∞ pentru $\overline{E}$ însă valorile nefizice sunt eliminate prin densitatea de stări $\rho(\overline{E})$ care are limita inferioară în valea cuantică de potenţial la nivelul cu numărul cuantic n=1,notat E_{c1} şi limita superioară la marginea de sus, ΔE_c a văii cuantice de potenţial (saltul în banda de conducţie la interfaţă). Prin urmare,lărgirea energiei datorată relaxării produce o lărgire a distribuţiei electronilor.In mod similar, pentru goluri se obţine

$$p(E'') = 2\int_{-\infty}^{\infty} \rho_v(\overline{E})[1 - f_v(\overline{E})] L_v(E'' - \overline{E}) d\overline{E}$$

$$L_v(E'' - \overline{E}) = \frac{\delta E_v}{2\pi} \frac{1}{[(E'' - \overline{E})^2 + (\frac{\delta E_v}{2})^2}; \qquad \delta E_v = \frac{\hbar}{\tau_v} \tag{4.5}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde τ_v este timpul de relaxare a golurior în banda de valenţă iar energia E″ se măsoară în jos de la marginea superioară a benzii de valenţă în semiconductorul masiv. Forma liniei tranziţiei între două stări de energie lărgite omogen, este tot Lorentziană, cu un timp de lărgire τ_{cv} dat de expresia

$$\frac{1}{\tau_{cv}} = \frac{1}{\tau_c} + \frac{1}{\tau_v} \tag{4.6}$$

în presupunerea că mecanismele de lărgire sunt independente în cele două benzi.Timpul de relaxare intrabandă pentru dipolul electron-gol este

$$\tau = 2\tau_{cv} \tag{4.7}$$

Factorul Lorentzian pentru un dipol de energie E este

$$L(E-\overline{E}) = \frac{\delta E}{\pi}\frac{1}{(E-\overline{E})^2 + (\delta E)^2} \tag{4.8}$$

unde

$$\delta E = \frac{\hbar}{\tau} \tag{4.9}$$

S-a presupus ca $\delta E << E$. Dacă luăm în considerare lărgirea distribuţiei purttorilor, trebuie să introducem factorul de lărgire Lorentzian şi în expresia amplificării

$$g(E) = \int_{-\infty}^{\infty} g(\overline{E})L(E-\overline{E})d\overline{E} \tag{4.10}$$

unde $g(\overline{E})$ este dat de relaţia (3.1) în care substituim pe $\hbar\omega$ cu $\overline{E}$.Substituind (3.1) în (3.10) rezultă [11]

$$g(E) = g_o(E)|M_T|^2 \sum_{n_c,n_v} \int_{E_g}^{E_{g,b}} \rho(\overline{E}-E_g)[f_c - f_v]L(E-\overline{E})d\overline{E} \tag{4.11}$$

Celelalte mărimi sunt definite în paragraful 4.3. Limitele integralei sunt cele determinate de limitele densităţii reduse de stări. S-a considerat că factorii din faţa integralei depind slab de energie. Se presupune că sunt satisfăcute legile de conservare a vectorului de undă şi energiei dipolului nelărgit

$$\mathbf{k}_c(E_n') = \mathbf{k}_v(E_n''); \qquad \overline{E} = E_g + E_n' + E_n'' \tag{4.12}$$

Daca $\overline{E}$ este fixat atât E_n' cât şi E_n'' sunt determinate. Pentru spectrul de emisie spontană, lărgit, se procedează în mod similar

$$R_{sp}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} R_{sp}(\overline{E})L(E-\overline{E})d\overline{E} \tag{4.13}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Avand în vedere ec.(3.4) rezultã

$$R_{sp}(E) = R_o(E)|M_T|^2 \sum_{n_c,n_v} \int_{E_g}^{E_{g,b}} \rho(\overline{E} - E_g) f_c(1 - f_v) L(E - \overline{E}) d\overline{E} \qquad (4.14)$$

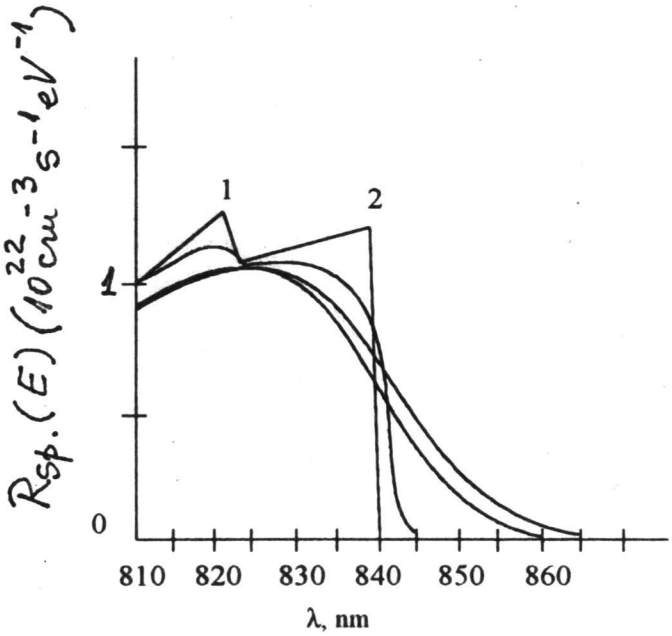


Fig. 4.10

unde $R_o(E)$ s-a scos în afara integralei deoarece s-a presupus cã depinde slab de energie. Valoarea integralei (3.5) pe întregul spectru nu se modificã prin lãrgirea spectrului de emisie (4.14) deoarece, datoritã legii conservãrii vectorului de undã, aria de sub curba spectralã rãmâne aceeași. Astfel, pentru curentul de recombinare spontanã rãmâne valabilã expresia (3.5). Pentru $\delta E \to 0$ ($\tau \to \infty$) factorul Lorentz $L(E-\overline{E})$ tinde la o funcție $\delta(E-\overline{E})$ și în acest caz integralele (4.11) si (4,14) se reduc la valorile din cazul absenței lãrgirii spectrale. Pentru lãrgime δE mare nu mai este valabilã aceastã descriere simplificatã deoarece funcția de distribuție Fermi-Dirac se aplicã pentru densitate de stãri nelãrgitã. De asemenea, descrierea nu este valabilã nici în cazul când semilãrgimea $2\delta E$ este de ordinul semilãrgimii spectrale a amplificãrii sau a emisiei spontane. In fig.4.10 și 4.11 se reprezintã spectrul amplificãrii și, respectiv, emisiei spontane, calculate dupã relațiile (4.11) și (4.14) pentru tranzițiile între subbanda de conducție și subbanda golurilor ușoare cu n=1 (prima treaptã) și între subbanda de conducție și subbanda golurilor grele (a doua treaptã) cu n=1 pentru patru valori ale timpului de relaxare τ:∞,0,5; 0,1; 0,07 ps și concentrațiile electronilor și golurilor injectate egale cu $3.10^{18} cm^{-3}$. Se observã cã lãrgirea datoratã relaxãrii intrabandã are urmãtoarele efecte: (1) micșorarea maximului amplificãrii cu creșterea lãrgirii,(2) creșterea lãrgimii spectrului datoritã "înclinãrii" marginii abrupte, (3) o deplasare a picului amplificãrii cãtre lungimi de undã mai mici cu creșterea densitãții purtãtorilor injectați. In final amintim cã în afara modelului relaxãrii intrabandã pentru explicarea lãrgirii spectrale a amplificãrii și a emisiei spontane existã și un alt model. Acesta este modelul cozii benzii care presupune existența unei distribuții continue a stãrilor de energie localizate în banda interzisã, la marginile benzilor permise, ceea ce conduce la nerespectarea regulii de selecție a lui **k**. In consecințã, elementul de matrice al tranziției devine dependent de energie. Argumentarea acestui model se face pe baza efectului de ecranare cauzat de cãtre impuritãți sau de cãtre goluri în regiunea activã a laserului. De asemenea, efectele excitonice deplasează tranziția sub lãrgimea benzii interzise.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

4.5. *Creşterea valorii elementului de matrice al tranziţiei optice în valea cuantică de potenţial în cazul radiaţiei polarizată TE.*

Am văzut că în valea cuantică de potenţial funcţia de undă a electronului posedă o simetrie planară în planul stratului subţire al văii cuantice.Aceasta implică o dependenţă de polarizarea radiaţiei a tranziţiilor optice stimulate.Elementul de matrice depinde de energia de tranziţie $E=\hbar\omega$ şi se poate scrie

$$|M_{in}(E)|^2 = K_{in}(E)|M_T|^2 = \frac{2}{3}K_{in}|M|^2 \qquad (5.1)$$

unde $K_{in}(E)$ este un factor de anizotropie dependent de polarizare.In procesul de reacţie (de întoarcere a radiaţiei), necesar pentru apariţia efectului laser se selectează în mod uzual modurile polarizate TE faţă de cele polarizate TM chiar atunci când amplificarea este independentă de polarizare,ca în cazul laserului cu heterojoncţiune dublă. Factorul de anizotropie determină o creştere a forţei oscilatorului în valea cuantică de potenţial pentru fotonii polarizaţi TE cu energia în apropierea picului (maximului) amplificării. Pentru fotonii polarizaţi TM apare o micşorare a forţei oscilatorului, îmbunătăţindu-se stabilitatea efectului laser În modul TE. Factorul de anizotropie a polarizării modului TE are următoarele valori [12]

$$K_{in}(E) = \frac{3}{4}[1 + \frac{E_{cn} + E_{v,in}}{E - E_{go}}] \qquad (5.2)$$

pentru i = h ,adică tranziţia în subbanda golurilor grele şi

$$K_{in}(E) = \frac{1}{4}[5 - \frac{3(E_{cn} + E_{v,in})}{E - E_{go}}] \qquad (5.3)$$

pentru i=u, adică tranziţia în subbnda de valenţă a gourilor uşoare.Este satisfăcută relaţia $E \geq E_{go}+E_{cn}+E_{vn}$ unde E_{go} este banda interzisă în semiconductorul masiv, E_{cn} este energia corespunzătoare subbnezii n a electronului măsurată de la marginea inferioară a benzii de conducţie, E_{vn} este energia golului din subbanda de valenţă, măsurată de la marginea superioară a benzii de valenţă. Se observă că cea mai puternică creştere se obţine pentru tranziţiile în subbanda golurilor grele la energie $E=E_{go}+E_{cn}+E_{vn}=E_g$ în care caz factorul de anizotropie $K_{in}=3/2$, ceea ce corespunde unei creşteri de 50%. La energii foarte mari ale fotonilor, $E>>E_g$, factorul de anizotropie scade către valoarea asimptotică ¾, deoarece în acest caz termenul al doilea din paranteza dreaptă (5.2) se anulează. Pe de altă parte, în cazul tranziţiilor în subbanda golurilor uşoare la energii apropiate de $E_g=E_{go}+E_{cn}+E_{vn}$ rata de tranziţie este micşorată deoarce $K_{in}=1/2$, însă aceasta creşte cu creşterea energiei fotonilor, atingând $K_{in}=5/4$ la energii foarte mari. Deoarece densitatea de stări în subbanda golurilor uşoare este redusă, aceasta contribuie mai putin la tranziţie decât subbanda golurilor grele. Având în vedere relaţiile (5.1)-(5.3) amplificarea spectrală se scrie

$$g(E) = g_0(E)|M_T|^2 \sum_{n_c, n_v} K_{in}(\bar{E})\rho(\bar{E} - E_g)[f_c - f_v]L(E - \bar{E})d\bar{E} \qquad (5.4)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

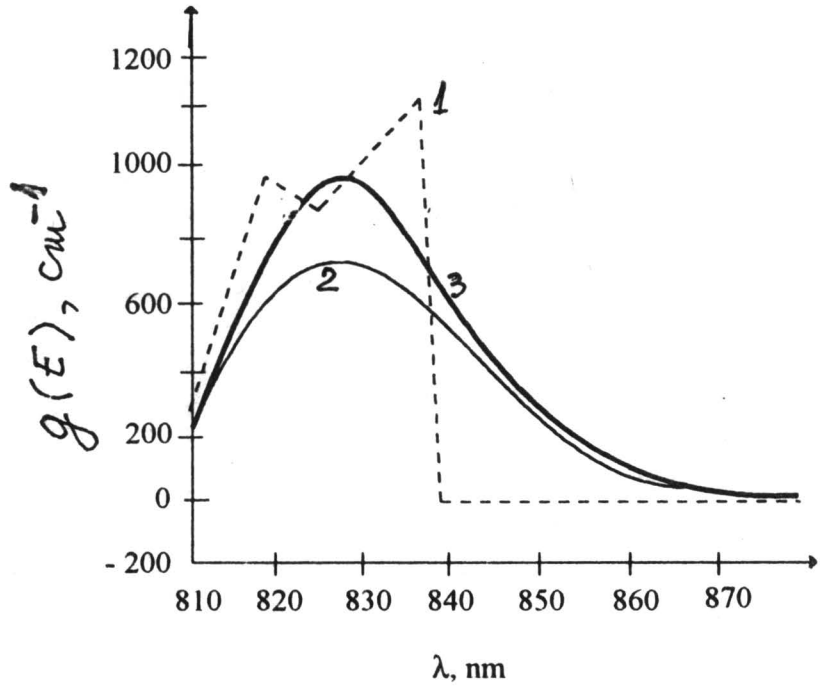


Fig. 4.12

La energii din jurul picului amplificării tranziţiile în subbanda de valenţă a golurilor uşoare aduc contribuţie slabă, astfel că picul amplificării este mărit pentru polarizarea TE datorită contribuţiei esenţiale a tranziţiilor în subbanda golurilor grele. In Fig.4.12 se reprezintă spectrul amplificării în cazul modelului simplificat (curba 1), în cazul când se ia în considerare lărgirea datorită relaxării intrabandă (curba 2) şi în cazul când se ia în considerare atât lărgirea cât şi creşterea datorită polarizării TE a radiaţiei (curba 3); acest ultim model se mai numeşte si modelul "exact". Concentraţia purtătorilor injectaţi este $n=3.10^{18}cm^{-3}$ iar $\tau=0,1$ ps. Cu concentraţia purtătorilor injectaţi se observă că amplificarea creşte rapid la nivel mic de injecţie şi se saturează la nivel mare de injecţie (Fig.4.13).

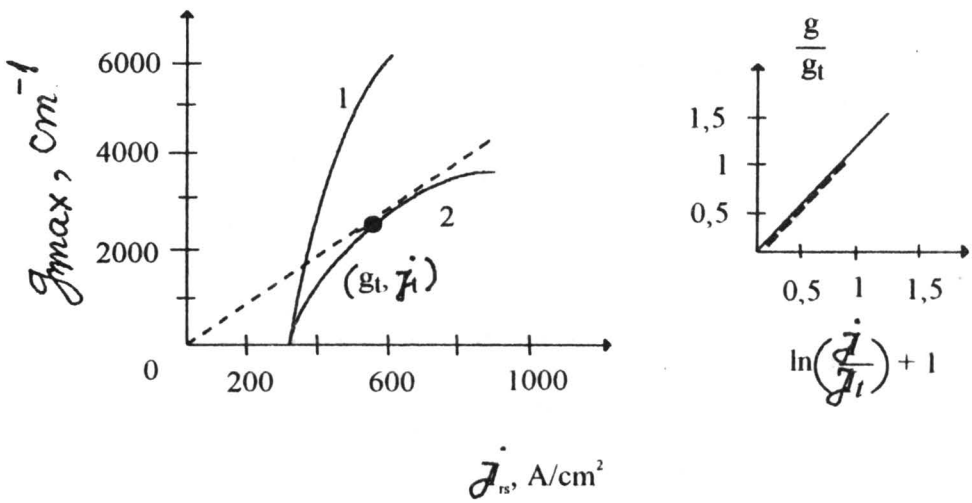


Fig. 4.13

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Această comportare se datorează umplerii benzii cu purtători, ca o consecinţă directă a formei de funcţie treaptă a densităţii de stări. Laserul cu vale cuantică se proiectează și se utilizează astfel ca amplificarea să fie pe porţiunea de creștere cu nivelul de injecţie, adică la densităţi mici de injecţie. In această regiune există o amplificare diferenţială $\beta=dg/dn$ mare (unde n este concentraţia purtătorilor injectaţi) și laserul cu vale cuantică are performanţe superioare faţă de laserul cu heterojoncţiune dublă. In Fig.4.13 sunt reprezentate două curbe, corespunzând la două valori diferite ale lărgimii barierei de potenţial, L=2,5 nm (curba 1) și 6 nm (curba 2)[13]. Revenind la rolul polarizării TE notăm că acesta este important în cazul calculului amplificării dar nu și în cazul ratei de recombinare spontană (și deci a curentului de recombinare spontană) deoarece în acest caz atât fotonii polarizaţi TE cât și cei polarizaţi TM sunt emiși aleatoriu. Prin urmare, curentul de recombinare este dat tot de expresiile (3.5),(3.6).

4.6. *Curentul de prag în laserul cu vale cuantică de potenţial.*

In fig.4.13 am reprezentat amplificarea maximă, g_{max}, în funcţie de densitatea de curent de recombinare spontană J_{rs} calculată pentru două văi cuantice,una de lărgime 2,5 nm (curba 1) și alta de lărgime 6 nm (curba 2) utilizând pentru g_{max} ec.(4.11) iar pentru J_{rs} ec.(3.5).Se observă că spre deosebire de laserul cu semiconductor masiv unde g_{max} creşte liniar cu curentul de injecţie (Fig.4.6) în cazul laserului cu vale cuantică de potenţial amplificarea are tendinţa de saturare la nivel mare de injecţie.Așa cum am amintit în paragraful precedent, acest fenomen are loc deoarece densitatea de stări în subbandă rămâne constantă cu creșterea energiei (fiind independentă de aceasta) astfel că cu urcarea cuasinivelului Fermi în subbandă rata de creștere a amplificării scade cu creșterea curentului. O nouă creștere semnificativă a amplificării apare atunci când cea de a doua subbandă se populează dens cu electroni ceea ce are loc la curenţi mai mari decât cei prezentaţi în Fig.4.13 și este acompaniată de o scădere a lungimii de undă deoarece maximul amplificării se deplasează la energii mai mari, corespunzătoare tranziţiilor în subbanda n=2. Pentru tranziţiile între subbenzile cele mai joase din valea cuantică de potenţial (adică n_c=, n_v=1) s-a presupus relaţia amplificare-curent de forma [14]

$$\frac{g}{g_t} = \ln(\frac{J}{J_t}) + 1 \qquad (6.1)$$

unde (g_t,J_t) este un punct de referinţă luat în Fig.4.13 ca punctul tangentei la curbă, tangentă ce trece prin origine. Așa cum se observă pe Fig.4.13 dreapta, relaţia (6.1) este în acord cu datele experimentale. Panta iniţială

$$\beta_o = \frac{dg}{dJ}\Big|_{J=0} = \frac{g_t}{J_o} \qquad (6.2)$$

unde $J_o=J_t/e=0,37J_t$ este densitatea de curent la transparenţă.Curentul de transparenţă se obţine din ec. (6.1) pentru $g/g_t=0$. Rezultatele experimentale arată că curentul de transparenţă J_o în laserul cu vale cuantică nu tinde la zero cu scăderea lărgimii văii cuantice ci este aproximativ independent de L și chiar tinde să crescă pentru lărgime foarte mică a văii cuantice;în cazul laserului cu semiconductor masiv, aceasta scade cu scăderea grosimii stratului subţire activ.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

De asemenea,amplificarea diferenţialã iniţialã β_o este mai mare pentru valea cuanticã decât pentru semiconductorul masiv deşi în ambele cazuri β_o şi g_p scad cu creşterea grosimii stratului activ. Densitatea efectivã de stări în valea cuanticã de potenţial variazã liniar cu temperatura. Pentru a demonstra aceasta scriem expresia densitãţii de electroni pe unitatea de arie într-o singurã subbandã

$$n_s = 2\int_0^{\infty} \rho_c(E) f_c(E) dE \tag{6.3}$$

unde densitatea de stări pe unitatea de arie este datã de expresia

$$\rho_c(E)dE = \frac{m_t}{2\pi\hbar^2} dE \tag{6.4}$$

m_t este masa efectivã a electronului în planul yz paralel cu stratul subţire. Se obţine

$$n_s = \frac{m_t}{\pi\hbar^2} \int_{E_{nc}}^{\infty} \{1 + \exp(\frac{E - F_n}{kT})\}^{-1} de = \frac{m_t}{\pi\hbar^2} kT \ln\{1 + \exp(-\frac{E_{nc} - F_n}{kT})\} \tag{6.5}$$

Densitatea efectivã de stări

$$N_c = \frac{m_t}{\pi\hbar^2} kT \tag{6.6}$$

depinde liniar de temperaturã.La nivel mic de injecţie, când F_n se aflã cu multe valori kT sub E_{nc}, termenul exponenţial în ec.(6.5) este mic în comparaţie cu unitatea şi se poate scrie $\ln(1+x) \approx x$, astfel cã

$$n_s = \frac{m_t kT}{\pi\hbar^2} \exp[-\frac{E_{nc} - F_n}{kT}] \tag{6.7}$$

Aceasta este similarã cu o dependenţã Boltzmann pentru gazul de electroni 3D nedegenerat, cu deosebirea cã în acest caz densitatea de stări variazã liniar cu temperatura.La nivel mare de injecţie, când $F_n >> E_{nc}$,t ermenul exponenţial din (6.5) este mult mai mare decât unitatea şi se obţine

$$n_s = \frac{m_t kT}{\pi\hbar^2} [\frac{F_n - E_{nc}}{kT}] \tag{6.8}$$

Concentraţia purtãtorilor injectaţi depinde liniar de $(F_n - E_{nc})$ deoarece pentru o singurã subbandã densitatea de stări nu depinde de energie. Intrucat în laserul cu vale cuanticã densitatea efectivã de stări este proporţionalã cu T (ec.6.6) în laserul cu vale cuanticã curentul de prag are o dpendenţã de temperaturã mai slabã decât în laserul cu semiconductor masiv. In cele ce urmeazã vom discuta urmãtoarele trei probleme: (1) dependenţa curentului de prag de lãrgimea vãii cuantice, (2) dependenţa curentului de prag de lungimea cavitãţii laserului şi (3) dependenţa curentului de prag de temperaturã.

4.6.1. *Dependenţa curentului de prag de lãrgimea vãii cuantice.*

In Fig.4.14 se reprezintã dependenţa curentului de prag de grosimea regiunii active într-un laser cu heterojoncţiune dublã (1), într-un laserr cu mai multe vãi cuantice (2),într-un laser cu mai multe vãi cuantice însã cu confinare separatã (3) şi într-un laser cu o singurã vale cuanticã, cu indice de refracţie gradat şi cu confinare separatã [15]. Acesta din urmã se

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

numeşte în literatura străină GRINSCH de la iniţialele cuvintelor Graded Refractive Index (GRIN) şi Separate Confinement Heterostructure (SCH). In Fig.4.15 se reprezintă diverse structuri cu vale cuantică de potenţial şi densitate de stări de energie : (a) o singură vale cuantică, (b) văi cuantice multiple, (c) vale cuantică cu confinare separată, (d) GRINSH. Pentru un număr N mic de văi cuantice situate în centrul ghidului laserului, factorul de confinare G_t este proporţional cu N iar factorul de confinare pentru o singură vale G este proporţional cu lărgimea L a văii cuantice

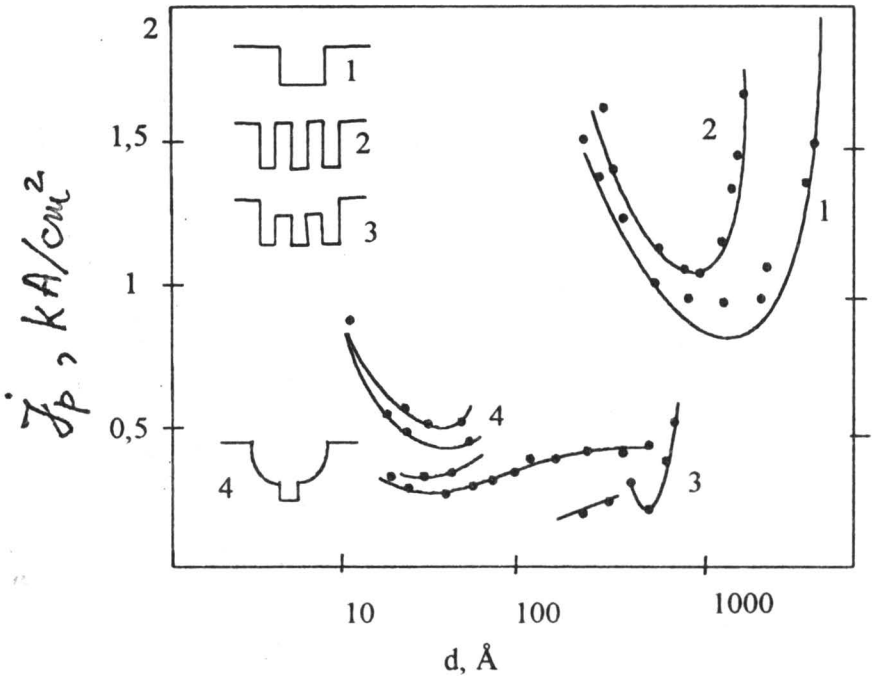


Fig. 4.14

$$\Gamma_t = N\Gamma = N\Gamma_o L \tag{6.9}$$

unde am notat $\Gamma=\Gamma_o L$. Curentul la prag,pentru o singură vale cuantică, este dată de expresia

$$J_p = \frac{G}{N\Gamma} \tag{6.10}$$

Densitatea de curent de prag J_p se obţine din densitatea de curent de recombinare spontană J_{rs} pentru o vale cuantică, corespunzătoare lui g_p, utilizând relaţia

$$g_p = \frac{N}{\eta} J_{rs,p} \tag{6.11}$$

Introducând în (6.1) se obţine

$$\ln\left(\frac{\eta J_p}{N J_t}\right) = \frac{G}{N\Gamma g_t} - 1 \tag{6.12}$$

Dacă considerăm, în primă aproxiamţie,că J_t este independent de L, g_t~1/L si Γ~L, rezultă din ec.(6.12) că curentul de prag J_p ste aproximativ independent de lărgimea L a văii cuantice. Pentru N=1, h=1,G=60 cm^{-1}, Γ=0,35, L=10 nm, g_t=10^3 cm^{-1}(A.cm^{-2})$^{-1}$ se obţine J_p=410 A/cm^2. Aceasta este o valoare apropiată de cea a unui laser cu heterojoncţiune dublă cu confinare separată. Utilizând rezultate experimentale mai precise ale parametrilor care intră în relaţia (6.12) se obţine dependenţa curentului de prag de lărgimea văii cuantice aşa

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

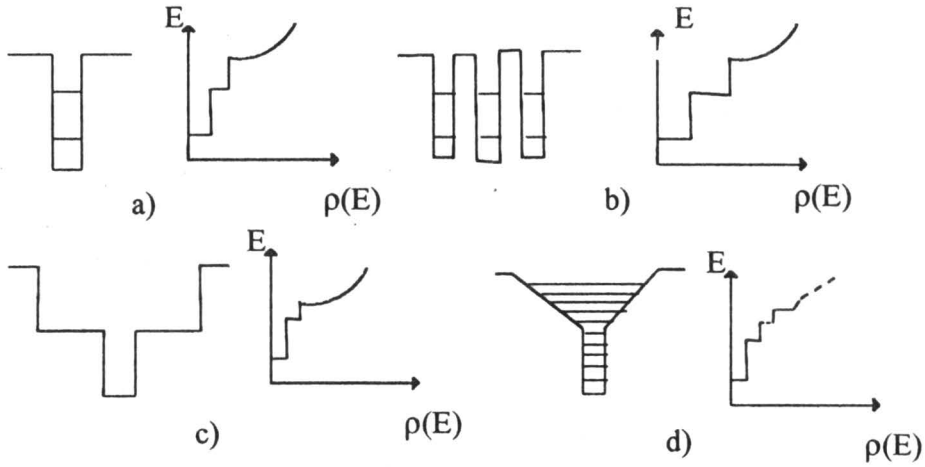


Fig. 4.15

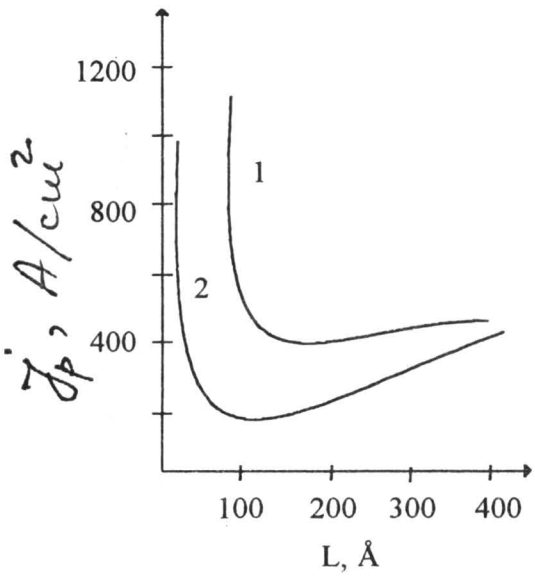


Fig. 4.16

cum se reprezintă în Fig.4.16 [10].Se observă că J_p crește cu scăderea lărgimii văii cuantice la valori mici ale acesteia ,în principal datorită creșterii influenței lărgirii timpului de viață cu creșterea densității purtătorilor injectați în văi mai subțiri și tendinței de saturație a curbei amplificare-curent. Curba 1 se referă la o vale cuantică cu confinare separată, curba 2 se referă la GRINSCH. Din Fig.4.16 se observă că curentul de prag prezintă un minim în funcție de lărgimea văii cuantice. Aceasta se poate înțelege mai clar studiind umplerea cu electroni a stărilor din valea cuantică. Popularea cu electroni a subbenzilor superioare (lui n_c=1) din banda de conducție, apare în special în văile largi. Totuși, în văile foarte subțiri nivelul Fermi se ridică atât de sus în valea cuantică (datorită valorii mari a energiei de confinare) încât o parte din purtătorii injectați se revarsă din zona activă în cavitatea de confinare optică ceea ce face să crească curentul de trnasparență J_o ($\equiv J_t/e$).Astfel apare mai clar de ce există o lărgime optimă a văii cuantice pentru minimul curentului de prag. In Fig.4.17 este reprezentată densitatea de stări de energie și ocuparea acestora cu electroni în valea cuantică de potențial cu confinare separată (a), în GRINSCH (b) și într-o structură cu văi cuantice multiple (c). Diferența dintre curba 1 și curba 2 în Fig.4.16 se poate înțelege urmărind ocuparea cu electroni a stărilor de energie în Fig.4.17a și b. Pe figură este hașurată cu linie orizontală și indicată cu săgeată zona ocupată cu electroni din cavitatea optică (electronii "vărsați" din regiunea activă în regiunea cavității optice). La prag numărul de electroni de pe stările din cavitatea optică a văii cuantice cu confinare separată este aproape egal cu numărul de electroni din regiunea activă (Fig.4.17a). Deoarece în cavitatea optică triunghiulară densitatea de stări este mai mică numărul de electroni din cavitatea optică în structura GRINSCH la prag este de numai 20% în timp ce în zona activă este de 80%.Deoarece în cavitatea de confinare optică a structurii GRINSCH sunt "vărsați" mai

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

puţini purtători, curentul de transparenţă J_o este mai mic şi deci şi curentul de prag este mai mic. Există şi efecte de ordinul doi care pot fi luate în considerare cum ar fi lărgirea nivelelor datorită diverselor efecte de coliziune, modificarea elementului de matrice datorită energiei cinetice, mixarea stărilor din banda de valenţă, interacţiunea Coulomb între purtători. Însă toate acestea au un efect slab în comparaţie cu cel prezentat mai sus.

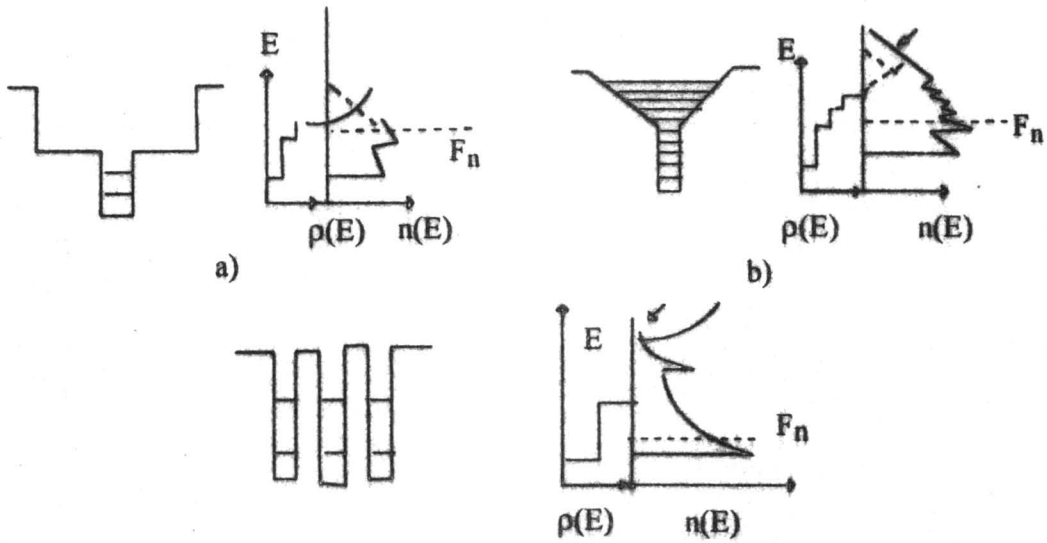


Fig. 4.17

4.6.2. *Dependenţa curentului de prag de lungimea cavităţii optice.*

Substituind expresia (2.80) a lui G în ec.(6.12), densitatea de curent de prag se scrie

$$\ln(J_p) = \{\frac{\ln(1/R)}{N\Gamma g_t}\}\frac{1}{L_c} + \{\frac{\alpha}{N\Gamma g_t} + \ln(\frac{NJ_t}{\eta}) - 1\} \tag{6.13}$$

unde L_c este lungimea cavităţii optice. Se observă că $\ln(J_p)$ variază cu $1/L_c$.Notând cu w lărgimea benzii metalice (a contactului ohmic) se poate scrie curentul total de prag $I_p = wL_cJ_p$ şi prin urmare,

$$\ln(\frac{I_p}{w}) = \{\frac{\ln(1/R)}{N\Gamma g_t}\}\frac{1}{L_c} + \ln L_c + \{\frac{\alpha}{N\Gamma g_t} + \ln(\frac{NJ_t}{\eta}) - 1\} \tag{6.14}$$

Această funcţie are valoarea maximă la

$$L_c = \frac{\ln(1/R)}{N\Gamma g_t} \equiv L_{opt} \tag{6.15}$$

Prin urmare, panta ec.(6.13) reprezintă valoarea optimă a lungimii cavităţii optice. Atunci când $L_c > L_{opt}$, g_p are valoare mică şi contribuţia majoră la I_p o aduce curentul de transparenţă, astfel că I_p creşte cu creşterea lui L_c.Când $L_c < L_{opt}$, g_p are valoare mare şi contribuţia majoră la I_p o aduc pierderile optice (adică curentul necesar pentru egalarea acestor pierderi). Cu micşorarea lui L_c creşte g_p până atinge o saturaţie, J_p creşte supraliniar în $1/L_c$ astfel că I_p creşte cu scăderea lui L_c deşi scade aria dispozitivului. In Fig.4.18 se reprezintă dependenţa curentului de prag de lungimea cavităţii L_c într-un laser GRINSCH

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

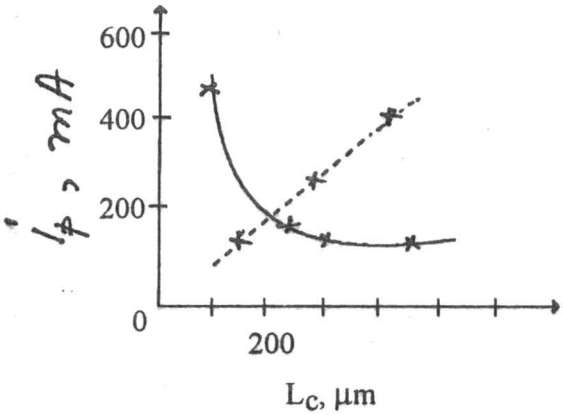


Fig. 4.18

[16]. Se observă că există o bună concordanţă între rezultatele teoretice şi cele experimentale. Pe aceeaşi figură este reprezentată (cu linie întreruptă) dependenţa I_p de L_c pentru un laser cu heterojoncţiune dublă(convenţional). In cazul laserului convenţional curentul de prag creşte liniar cu creşterea lungimii cavităţii. Dacă utilizăm datele din Fig.4.18 şi reprezentăm $\ln J_p$, pentru w=60 mm, în funcţie de $1/L_c$ se obţine o linie dreaptă în acord cu ec.(6.13). Pentru R=0,13, Γ=0,01 din panta acestei drepte se obţine g_t=2500 cm^{-1}. Pentru a=3 cm^{-1} intersecţia acestei drepte cu axa $1/L_c$ da J_t/η=483 A/cm^2 (conform cu ec.(6.13)). Având în vedere că η<1 rezultă că această valoare reprezintă limita superioară a lui J_t. Panta dreptei are valoarea $\ln(1/R)/N\Gamma g_t$ =482 mm şi reprezintă lungimea optimă a cavităţii, L_{opt}. In acord cu ec.(6.15) L_{opt} poate fi micşorat, de asemenea, prin mărirea reflectivităţii feţelor cavităţii. Pentru R=0,75 se obţin L_{opt}=115 mm şi I_p se reduce la 38 mA pentru w=60 mm.

4.6.3. *Dependenţa curentului de prag de temperatură.*

In fig.4.19 se reprezintă dependenţa de tempeartură a curentului de prag (cruciulişe) precum şi a ratei de emisie spontană (puncte pline) pentru un laser cu vale cuantică cu lărgimea de 6 nm [17]. Se observă că la prag rata de recombinare spontană creşte liniar cu temperatura datorită creşterii lărgimii dupa energia termică a distribuţiei purtătorilor de sarcină. Curentul de prag variază însă mai rapid cu temperatura în jurul temperaturii camerei ,în comparaţie cu rata de recombinare spontană, deoarece la curent contribuie pe lângă curentul de recombinare radiantă şi curentul de recombinare neradiantă. Dependenţa de temperatură a curentului de prag este dominată de aceste procese de recombinare neradiantă (recombinarea fononică prin intermediul nivelelor locale, recombinarea Auger) şi este aproximativ de forma

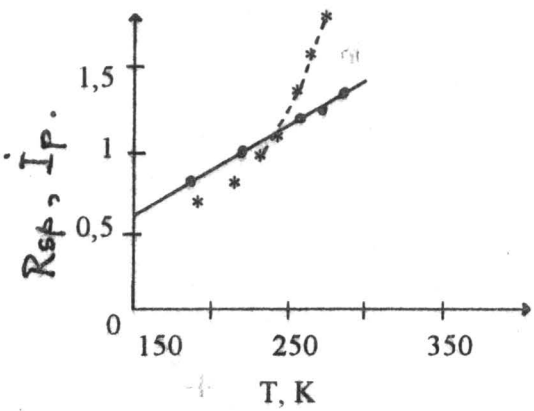


Fig. 4.19

$$J_p(T_2) = J_p(T_1)\exp\left(\frac{T_2 - T_1}{T_o}\right) \qquad (6.16)$$

unde T_2 şi T_1 sunt două temperaturi apropiate.Variaţia cu temperatura a curentului de prag este mai slabă atunci când T_o este mai mare, ceea ce este de dorit. T_o reprezintă o constantă care depinde de lărgimea funcţiei de distribuţie Fermi-Dirac, de "vărsarea, datorită creşterii temperaturii, a purtătorilor peste bariera de confinare, etc. In laserii cu văi cuantice de

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

potenţial efectul important asupra lui T_o îl are "vărsarea" purtătorilor din stratul de confinare al acestora.Având în vedere situaţia prezentată în Fig.4.17 există următoarele inegalităţi $T_o(SCH)<T_o(GRINSCH)<T_o(MQW)$ în care SCH se refera la laserul cu vale cuantică cu confinare separată (Fig.4.17a), GRINSCH, la laserul cu vale cuantică cu indice de refracţie gradat şi cu confinare separată (Fig.4.17b) iar MQW se referă la laserul cu mai multe văi cuantice (Fig.4.17c).Cel mai mare T_o îl are laserul cu văi cuantice multiple deoarece stările 3D sunt situate în acest caz mult mai sus în banda de conducţie în comparaţie cu celelalte două cazuri (Fig.4.17) astfel că coada distribuţiei Fermi nu se întinde decât peste stări 2D, care nu depind de energie. Structurile cu văi cuantice mai adânci cum ar fi cele de tipul GaInAs/GaAlAs/GaAs , care sunt tensionate, au T_o mai mare deoarece au confinare mai bună şi subbenzi, care se umplu cu electroni, mai joase. Relaţia (6.15) este o relaţie semiempirică. Revenind la expresia (6.11) a lui J_p se observă că acesta este direct proporţional cu curentul de recombinare $J_{r,s}$ şi invers proporţional cu eficienţa h . Scriind

$$\eta = \frac{J_{rs,p}}{J_p} = \frac{R_{sp,v}}{R_{sp,v} + R_{rb} + R_{nrb}} \tag{6.17}$$

unde $R_{sp,v}$ =Rsp. L este rata de recombinare spontană pe unitatea de arie din valea cuantică,R_{sp} este dat de relaţia (3.4), R_{rb} este rata de recombinare radiantă din regiunea barierei, care nu contribuie la efectul laser iar R_{nrb} este rata de recombinare neradiantă din regiunea barierei, pe unitatea de arie,

$$R_{nrb} = L_b \frac{n_b}{\tau_{nrb}}$$

unde L_b este lărgimea barierei, n_b este densitatea purtătorilor în barieră (care creşte cu creşterea temperaturii) iar τ_{nrb} este timpul de recombinare neradiantă în barieră. Rezultă ca η scade cu creşterea temperaturii şi întrucât $J_{rs,p}$ creşte liniar cu creşterea temperaturii rezultă din (6.17) că J_p are o creştere supraliniară cu temperatura .Referindu-ne la expresia (6.13) a curentului de prag constatăm următoarele. Curbele amplificare-curent arată că g_t este aproximativ independent de temperatură şi că dependenţa de temperatură a lui J_p este dată în principiu de J_t. Rezultă că panta dreptei $\ln J_p$ în funcţie de $1/L_c$ nu depinde de temperatură. Insă intersecţia acestei drepte cu axa $1/L_c$ scade cu creşterea temperaturii datorită scăderii lui J_t şi creşterii lui η. Această comportare se observă experimental trasând curbele $\ln J_p=f(1/L_c)$ pentru diverse temperaturi, aşa cum se reprezintă în Fig.4.20 pentru un laser cu lărgimea văii cuantice L=4 nm. Punctele sunt pentru un laser cu N=1 (o singură vale cuantică) iar cruciuliţele pentru un laser cu N=2 (zona activă are două văi cuantice). Se observă că panta dreptei pentru N=1 este de două ori mai mare decât pentru N=2 [18]. S-a presupus că η nu depinde de lungimea cavităţii L_c.

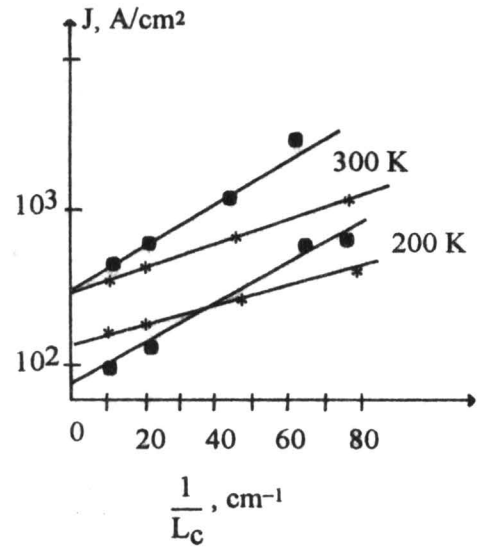


Fig. 4.20

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

4.7. *Laseri cu stratul văii cuantice tensionat mecanic.*

Primii laseri cu joncțiuni semiconductoare au fost construiți din AlGaAs-GaAs, având în vedere că materialele AlAs și GaAs au practic aceeași constantă a rețelei ($\Delta a/a$ <0,12%) și deci nu există neconcordanță de rețea la interfață și nici dislocații ce ar putea fi generate de aceasta în material. Domeniul de lungimi de undă în care pot funcționa laserii cu heterostructură dublă și cei cu vale cuantică construiți din aceste materiale este λ=0.88-0,65 mm. Limita lungimilor de undă lungi este determinată de marginea benzii de emisie a GaAs (E_{go}). Limita de lungimi de undă scurte este determinată de straturile active de AlGaAs sau de efectele cuantice de dimensiune în GaAs. Pentru acest domeniu de lungimi de undă se pot utiliza detectori din siliciu. Acești laseri stau la baza construirii unor circuite optoelectronice integrate. Se construiesc rețele de asemenea laseri de mare putere la λ=0,82 μm, utilizându-se pentru pompaj în laserul YAG: Nd. După heterostructura AlGaAs/GaAs. pentru construcția laserilor ca importanță apare sistemul de materiale InGaAsP-InP. Laserii cu heterojoncțiune dublă, convenționali, și cei cu vale cuantică construiți din aceste materiale pot funcționa în domeniul de lungimi de undă λ=1,1-1,6 μm. Laserii cu lungimea de undă λ=1,55 mm se utilizează ca surse de transmisie prin fibre optice (care au pierderi mici și dispersie optică minimă pe această lungime de undă), pentru comunicații. Asemenea straturi se obțin de bună calitate în special prin epitaxie din faza lichidă. Din cauza fosforului nu se obțin încă straturi foarte bune prin metodele de epitaxie cu fascicule moleculare sau depunere metal-organică din faza de vapori. Pentru domeniul 0,88-1,1 μm se utilizează laserii din $In_xGa_{1-x}As$/GaAs. In acești laseri discordanța dintre rețelele celor două materiale este mare, ajunge până la 3,6% pentru x=0,50, astfel că apar tensiuni în straturile respective. Aceste probleme sunt tratate în detaliu în paragraful 2.12. Important este că straturile să nu depășească o anumită grosime critică h_c de la care apar dislocații. Aceste grosimi critice pentru stratul de $In_xGa_{1-x}As$ în funcție de compoziția x sunt prezentate în Fig.2.31. Datorită compresiei biaxiale asupra stratului de $In_xGa_{1-x}As$, care constituie valea de potențial, din partea straturilor adiacente de GaAs (barierele de potențial) se modifică masele efective ale electronilor în benzile permise și se deplasează, unele față de altele, marginile benzilor. Aceste deplăsari au loc astfel încât banda interzisă a materialului tensionat devine mai mare decât banda interzisă a materialului netensionat (Fig.2.28) și apare o despicare între banda golurilor grele și banda golurilor ușoare astfel că banda interzisă cea mai mică este cea relativă la golurile grele. Pentru a înțelege efectele tensionării asupra amplificării în laserul cu compoziția $In_xGa_{1-x}As$/GaAs, în Fig.4.21 se reprezintă banda de valență a golurilor grele (h) și banda de valență a golurior ușoare (u) iîn funcție de valoarea vectorului de undă k (în unități $2\pi/a_o$, unde a_o este constanta rețelei GaAs), în direcție perpendiculară (⊥) și paralelă (||) pe interfața de creștere a straturilor, în $In_xGa_{1-x}As$ cu x = 0,30. Se observă că banda golurilor grele are masa efectivă (a golurilor) mare în direcție

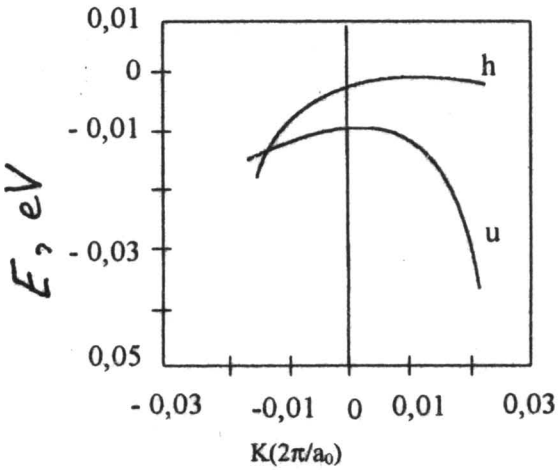


Fig. 4.21

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

perpendiculară pe planul interfeţei şi masa efectivă mult mai mică în direcţie paralelă cu acest plan. Masa efectivă în direcţie paralelă cu planul interfeţei are efect asupra densităţii de stări, care devine mai mică decât cea în direcţie perpendiculară, şi deci asupra amplificării şi densităţii de curent de prag în laserul cu vale cuantică de potenţial. In Fig.4.22 se reprezintă amplificarea pentru polarizare TE şi pentru polarizare TM a radiaţiei într-un laser tensionat supus la compresie biaxială (curbele punctate) şi supus la alungire biaxială (curbele pline) [19]. $\Delta a/a_o$=0,25%, densitatea purtătorior injectaţi este $2.10^{18}cm^{-3}$ şi se presupune că timpul de relaxare intrabandă este τ=0,2 ps. In laserul din $In_xGa_{1-x}As$-GaAs tensionat, maximul emisiei se deplasează la enegii mai mici din cauza tensionării şi

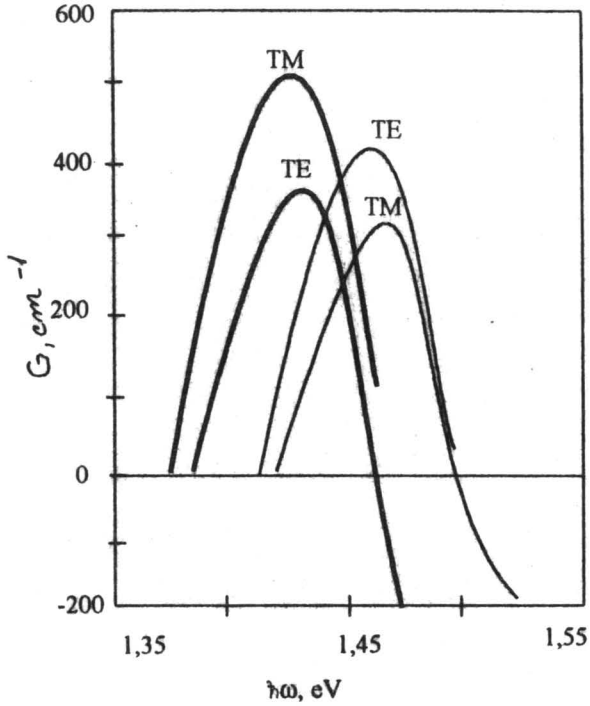


Fig. 4.22

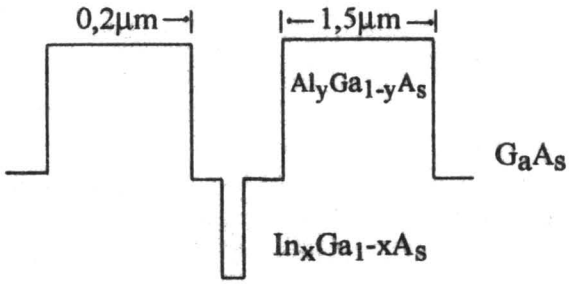


Fig. 4.23

este favorizat modul TE iar modul TM este estompat.La prag, cuasinivelele Fermi pentru electroni şi goluri trebuie să satisfacă condiţia F_n-F_p >hν unde hν este mai mare decât lărgimea bemzii interzise în semiconductorul masiv sau decât energia de tranziţie în valea cuantică de potenţial. Dacă regiunea activă este slab dopată, principiul echilibrului detaliat cere ca concentraţia

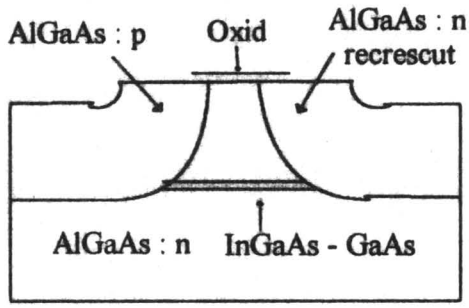


Fig. 2.24

electronilor injectaţi Δn să fie egală cu concentraţia golurilor injectate Δp. In laserul convenţional netensionat masa efectivă a golurilor este mult mai mare decât masa efectiva a electronilor astfel că cuasinivelul Fermi pentru electroni este situat in banda de conductie (degenerare) pe cand cuasinivelul Fermi pentru goluri este siutat în banda interzisă (nedegenerare). Diferenţa mare între probabilităţile de ocupare a stărilor de energie din banda de conducţie şi de valenţă determină un nivel de injecţie mai mare la prag în comparaţie cu cazul când densităţile de stări din cele două benzi ar fi aceleaşi. In laserul tensionat, micşorarea masei golurilor în direcţie paralelă cu interfaţa determină micşorarea densităţii purtătorilor injectaţi pentru a se obţine nivelul de prag. In laserul cu $In_{0,25}Ga_{0,75}As$ această micşorare este de mai mult decât de două ori. Micşorarea densităţii purtătorilor injectaţi la prag are încă două efecte favorabile: (1)

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

micşorarea pierderilor prin recombinare neradiantă la suprafaţă, (2) mişsorarea pierderior prin recombinare Auger. Un laser cu vale cuantică tensionată este reprezentat în Fig.4.23. Pe un substrat de GaAs n^+ orientat cu faţa (100) se creşte un strat tampon (în literatura străină, buffer) de GaAs n^+ de 0,15 μm grosime, apoi un strat de tip n de $Al_yGa_{1-y}As$ (y=0,20-0,85) gros de 1,5 μm, apoi un strat de GaAs de 0,2 μm grosime în mijlocul căruia se creşte stratul de $In_xGa_{1-x}As$ (x=0,08-0,42) de grosime L=7-14,5 nm (aceasta constituie valea de potenţial tensionată), apoi un strat de $Al_yGa_{1-y}As$ de tip p de grosime 1,5 μm şi în final un strat de GaAs p^+ de 0,2 μm grosime. Prin procedeul standard de fotolitografie se depune peste proba o bandă de oxid de lăţime 150 μm. Dupa ce substratul (care este de tip n) este polizat şi bine curăţat se depune pe el contactul ohmic din Ge/Au prin aliere. Contactul ohmic pe faţa de tip p se depune prin evaporare de Cu/Au. Prin clivare se obţin cavităţi de lungimi dorite (~500 μm). Curentul de prag este în jur de 150 A/cm^2. Straturile de $Al_yGa_{1-y}As$ sunt pentru confinare. In Fig.4.24 se prezintă un laser cu vale cuantică tensionată care prezintă şi confinare laterală a purtătorilor şi a radiaţiei [20]. Acest laser are lăţimea benzii regiunii active de 3,5 μm, lungimea cavităţii 405 μm,curentul de prag 7 mA, emite pe lungimea de undă l ~ 1,074 μm şi are o eficienţă cuantică diferenţială de 60% iar puterea de ieşire de 130 mW. Cu o reţea de asemenea laseri s-a obţinut o putere continuă de 3 W [21].

4.8. *Laseri cu văi cuantice multiple.*

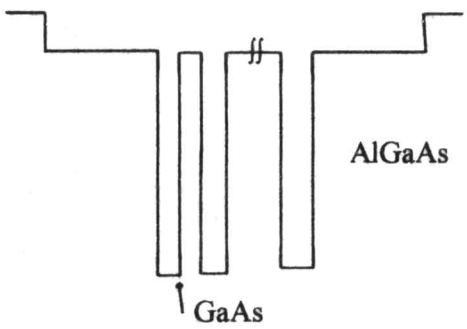


Fig.. 4.25

Un laser cu zona activă construită din mai multe văi cuantice este reprezentat în fig.4.25. Dacă presupunem o injecţie omogenă a purtătorilor în toate văile cuantice şi că G_t este proporţional cu lărgimea stratului activ atunci amplificarea totală $G=\Gamma_t g$ în funcţie de curentul ce trece prin structură, având în vedere relaţiile din paragraful 4.6, arată că în Fig.4.26. Lărgimea unei văi de potenţial este L=12 nm. Notaţia de pe curbe corespunde numărului de văi din zona activă. Din comparaţia acestor curbe se observă că la pierderi mici este mai bun laserul cu o singură vale cuantică deoarece are curentul de transparenţă mai mic (este necesară inversia de populaţie într-o singură vale) şi pierderile mai mici (care sunt proporţionale cu numărul văilor). La pierderi mari este mai bun laserul cu mai multe văi cuantice deoarece amplificarea în funcţie de curent are panta mare şi la valori mari ale amplificării, pe când în laserul cu o singură vale amplificarea ajunge la saturaţie. In

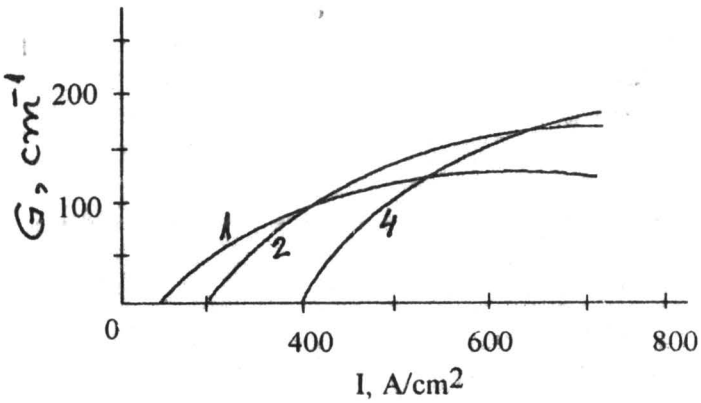


Fig. 4.26

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unele cazuri amplificarea, care ajunge la saturaţie în laserul cu o singură vale cuantică,nu este suficient de mare şi este necesar un laser cu mai multe văi cuantice pentru a se obţine amplificarea de prag necesară. In Fig.4.27 se reprezintă amplificarea diferenţială A=dg/dI într-un laser cu o singură vale (SV) şi într-un laser cu mai multe văi cuantice (MV) [22].

In laserul SV, A=3,8 $cm^{-1}mA^{-1}$, în laserul MV, A=10 $cm^{-1}mA^{-1}$ iar în laserul 3D, A=2 $cm^{-1}mA^{1}$. Se observă că laserul MV are cea mai mare amplificare diferentiala. De aceea laserul MV are frecventa de modulare mai mare şi lărgimea liniei mai mică. Frecvenţa de relaxare este dată de expresia $\Omega=(AP/t)^{1/2}$ unde A este amplificarea diferenţială, P este puterea laserului şi τ este timpul de viaţă a fotonilor în cavitate. Timpul de viaţă a fotonior scade şi deci

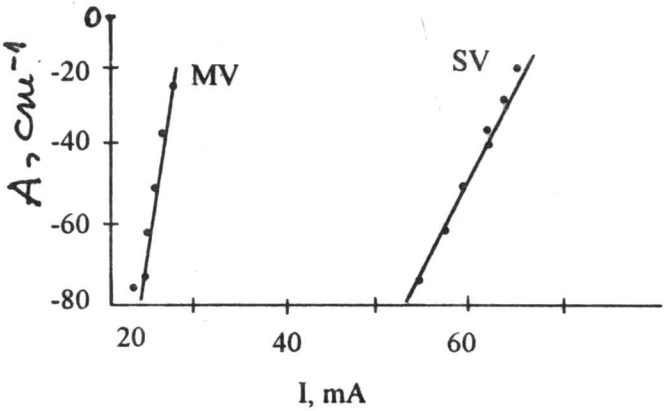


Fig. 4.27

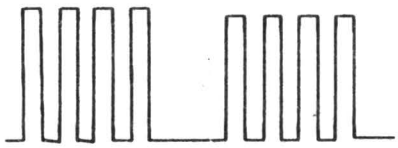


Fig. 4.28

creşte frecvenţa de modulare cu micşorarea lungimii L_c a cavităţii. Pentru o lungime dată a cavităţii există un număr optim de văi pentru a avea curentul de prag minim. Acest număr creşte cu scurtarea cavităţii. Intr-un laser în care regiunea activă conţine 3 văi cuantice, cu lungimea cavităţii 150-200 μm, construit din GaAs/AlGaAs s-a obţinut o lărgime a benzii de modulare egală cu 14 GHz şi frecvenţa oscilaţiilor de relaxare de 36 GHz [23]. Laserul cu o singură vale cuantică are curent mic de prag atunci când are cavitatea lungă. Realizarea laserilor de curent mic de prag cu văi cuantice subţiri este limitată de către lărgirea spectrului datorită fluctuaţiilor grosimii văii şi de către recombinarea în regiunile barierelor atunci când separarea între cuasinivelele Fermi este mare. O posibilitate de micşorare a vitezei de recombinare în regiunea barierei constă în înlocuirea stratelor de barieră adiacente văii de potenţial cu superretele de perioada scurtă. In Fig.4.28 se reprezintă o structură cu o vale cuantică din GaAs şi cu cele două bariere formate din superreţele construite din compuşii $(GaAS)_m(AlAs)_n$ în loc de AlGaAs. Indicele m însemnează numărul de straturi atomice din valea de potenţial a superreţelei (care este GaAs) iar indicele n insemnează numărul de straturi atomice din bariera de potenţial a superreţelei (care este AlAs). In cazul de faţă m=9 si n=3; prin urmare perioada supereţelei este scurtă.In acest caz se obţine un curent de prag mai mic în comparaţie cu cazul când barierele sunt construite din AlGaAs deoarece este diminuată rata recombinării neradiante în bariere [24].

4.9. *Laseri cu fire cuantice.*

In Fig.4.29 se reprezintă un fir cuantic de formă rectangulară în care are loc confinarea purtătorilor de sarcină in direcţiile x şi y.Valorile permise ale vectorului de undă **k** sunt

$$k_x = \frac{n\pi}{L_x}, \qquad k_y = \frac{l\pi}{L_y}, \qquad k_z = \pm\frac{2m\pi}{L_z} \tag{9.1}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

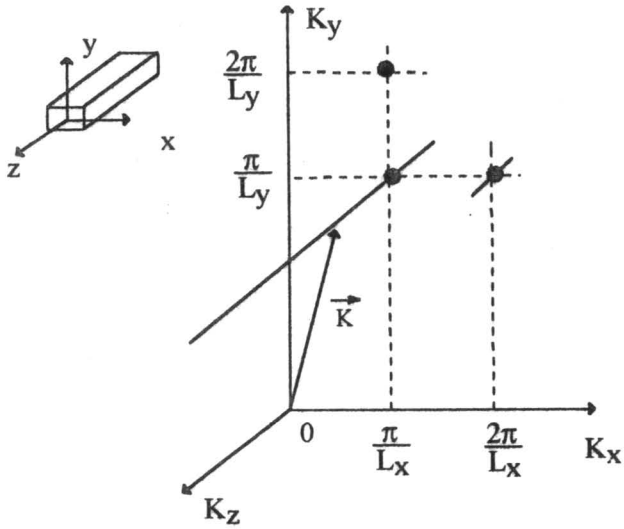


Fig. 4.29

unde n, l, m sunt nuere intregi. Deoarece dimensiunile L_x și L_y sunt mici, k_x și k_y iau valori discrete .Deoarece L_z este mare valorile permise ale lui k_z formează un comtinuum de puncte foarte apropiate intre ele, astfel că valorile permise ale vectorului de undă **k** se găsesc situate de-a lungul unei serii de linii situate in spațiul **k** paralele cu k_z și care intersecrează planul (k_x,k_y) in puncte discrete, asa cum se reprezintă in fig.4.29. In cazul unei văi cuantice, unde numai k_x este confinat, valorile permise ale lui **k** se află într-o serie de plane paralele cu planul (k_y,k_z) localizate la valori discrete de-a lungul axei k_x. Revenind la firul cuantic, minimul energiei in fiecare subbandă corespunde lui k_z=0, astfel că energia unei subbenzi este dată de expresia

$$E_{n,l} = \frac{\hbar^2}{2m}[(\frac{n\pi}{L_x})^2 + (\frac{l\pi}{L_y})^2] \qquad (9.2)$$

și densitatea de stări permise deasupra marginii unei subbenzi datorită stărilor permise continui în directia k_z este

$$\rho(E)dE = \frac{1}{\pi L_x L_y}\sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}}(E - E_{n,l})^{-1/2}dE \qquad (9.3)$$

pe unitatea de volum. Această densitate de stări este reprezentată în Fig.4.30. Ingustarea distribuției densității de stări cu reducerea dimensionalității determină o confinare a distribuției energiei purtătorilor în regiuni spectrale mai înguste în comparație cu cazul văii cuantice. De aceea și amplificarea optică in laserul cu fir cuantic va fi mai mare. Amplificarea este data de expresia (4.11)

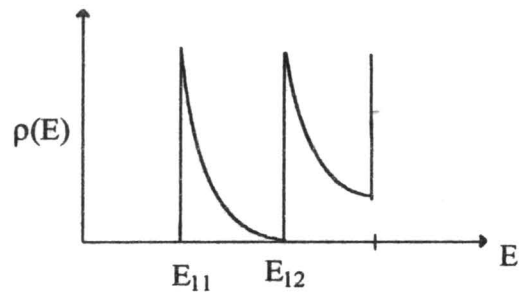


Fig. 4.30

$$g(n,\omega) = \omega\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}}\int dE'|M|^2\rho(f_c - f_v)\frac{\hbar/\tau}{(E' - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau)^2}$$

unde E′ este energia de tranziție, μ este permeabilitatea, ε este permitivitatea, M este elementul de matrice al tranziției de dipol, ρ este densitatea redusă de stări, f_c si f_v sunt funcțiile de distribuție Fermi in banda de conducție și, respectiv, de valență, τ este timpul de relaxare intrabandă.Spectrele amplificării calculate după această relație pentru o vale cuantică cu L_x=12 nm este reprezentat în Fig.4.31a iar pentru un fir cuantic cu L_x=12 nm, L_y=20 nm este reprezentat in fig.4.31b la T=77K pentru τ=0,1 ps [25].Numerotarea curbelor corespunde diverselor niveluri de injecție n=1,2,3,5.10^{18}cm^{-3}. Laserii sunt construiți din GaInAs (valea sau

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

diverselor niveluri de injecţie n=1,2,3,5.10^{18}cm^{-3}. Laserii sunt construiţi din GaInAs (valea sau firul) şi GaInAsP (barierele). In firul cuantic nivelul fundamental din valea cuanticã se despicã în trei subbenzi datoritã apariţiei in plus a unei confinări pe cea de a doua direcţie, L_y. Deoarece în firul cuantic densitatea de stări dintr-o subbandã este mai mare decât in valea cuanticã şi amplificarea este mai mare cu un factor aproximativ egal cu 2, la aceeaşi densitate a purtãtorilor de sarcinã. Aceasta determina o creştere a amplificării diferenţiale, dg/dn. In firul cuantic profilul densităţii de stări este mai îngust şi deci şi spectrul amplificării este mai îngust. In calculul spectrelor din Fig.4.31 s-a considerat aceeaşi valoare a lui τ. Insã este posibil ca în firul cuantic (FC) τ sã fie mai mare decât în valea cuanticã datoritã reducerii

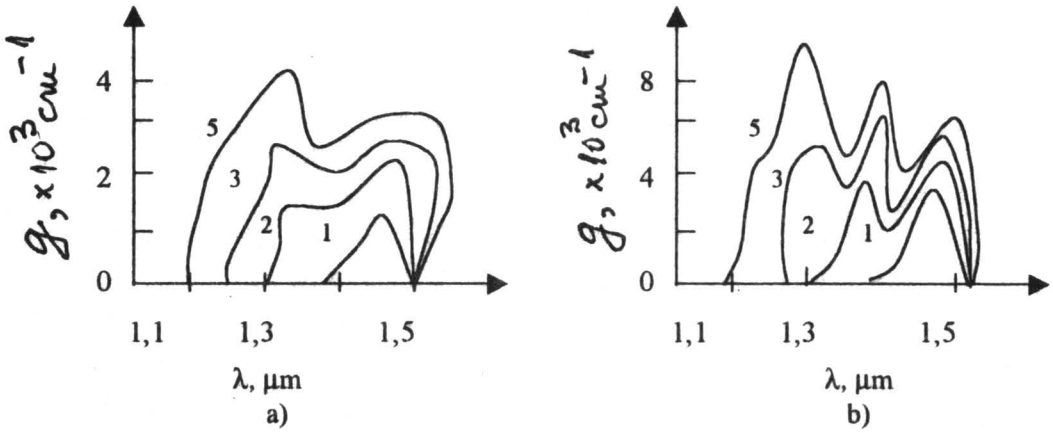


Fig. 4.31

spaţiului fazelor şi deci şi amplificarea sã fie mai mare. Insã maximul amplificării poate fi diminuat şi spectrul lãrgit datoritã fluctuaţiilor de dimensiune în secţiunea firului. Anizotropia momentului de dipol in FC conduce, de asemenea la creşterea amplificării pentru lumina polarizatã de-a lungul firului, adicã aceea care se propaga perpendicular pe fir; aceasta creştere este cu un factor 2 [26]. Curentul de prag în FC este mic. Amplificarea la prag este datã de expresia generala

$$G = \Gamma g_p = \alpha + \frac{1}{2L_c}\ln\left(\frac{1}{R_1R_2}\right) \equiv \alpha_c$$

unde Γ este factorul de confinare opticã (fracţiunea din puterea modului optic ce se gãseşte în regiunea activã, $\alpha=\Gamma\alpha_e+\alpha_i$ este coeficientul de pierderi în ghidul de undã, α_e este coeficientul de pierderi prin absorbţie pe purtãtori de sarcinã liberi, α_i este coeficientul de pierderi prin difracţie, L_c este lungimea cavităţii iar R_1 şi R_2 sunt coeficienţii de reflexie la oglinzi. La nivel de injectie nu prea mare, se poate presupune ca existã urmãtoarea relaţie liniarã

$$g = (N - N_o)\frac{dg}{dN}$$

unde N_o este densitatea purtãtorilor injectaţi la transparenţã.Notând cu V_a volumul regiunii active curentul de transparen volumul regiunii active curentul de transpareţã I_o şi curentul I sunt daţi de expresiile

$$I_o = \frac{qV_aN_o}{\eta\tau_c}, \quad I = \frac{qV_aN}{\eta\tau_c} \tag{9.4}$$

unde η este eficienţa cuanticã şi τ_c este timpul de viaţã a purtãtorilor în cavitate. Curentul de prag este dat de expresia

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$I=I_o+I_c \tag{9.5}$$

unde

$$I_c = \frac{qV_a\alpha_c}{\eta\tau_c g'} + \frac{qA}{\eta\tau_c g'}[\alpha_i L_c + \ln(1/R_1R_2)] \tag{9.6}$$

unde A este aria secţiunii transversale a modului de radiaţie şi $g' = dg/dN$. Din relaţiile (9.4)-(9.6) se trag concluzii de proiectare a unui laser cu curent mic de prag. Curentul de transparenţă este proporţional cu volumul regiunii active şi deci el este mic în FC sau în puncte cuantice (PC). Amintim că curentul de transparenţă I_o este curentul de prag minim atins la limita când pierderile în cavitate se anulează.I_o poate fi diminuat prin diminuarea volumului regiunii active şi a lui N_o.I n FC are loc o diminuare a lui N_o deoarece are loc o diminuare a masei golurilor grele datoritã mixãrii benzilor golurior grele şi uşoare ceea ce determinã o separare mai mare a cuasinivelelor Fermi la o densitate de purtãtori datã.I_c (9.6) reprezintã curentul din cavitate. La densitate micã de purtãtori injectati,la prag,primul termen din ec.(9.6), care reprezintã pierderile prin absorbţie pe purtãtori liberi, poate fi neglijat în comparaţie cu I_o. Al doilea termen din (9.6), care este dominant, poate fi diminuat prin diminuarea lui A (prin confinare opticã strânsã), prin creşterea lui g', a lui η şi a lui τ_c şi prin reducerea pierderilor în cavitate. Pentru creşterea lui η şi τ_c este necesar ca vãile (sau firele) cuantice sã aibã interfeţe aproape ideale. Considerãm o structurã laser cu un singur fir cuantic, din GaAs/AlGaAs, cu $A \sim 1\mu m^2$, $\tau_c=3$ ns,$g' \sim 10^{15} cm^2$ şi $\eta=1$. Rezultã cã $qA/\eta\tau_c g'=0{,}53$ mA. Pentru $L_c=100$ μm, $a_i=10$ cm^{-1}, R=0.9 se obţine $I_c=11$ μA. Asemenea structuri cu fire cuantice, care sã aibã curentul de prag în domeniul microamperilor se obţin prin acoperirea cu oglinzi cu reflexie mare şi prin utilizarea ghidurilor optice cu confinare separatã şi cu pierderi mici. La densitãţi mari ale purtãtorilor de sarcinã injectaţi apare o saturaţie a amplificãrii, ceea ce nu s-a luat în considerare în evaluãrile de mai sus. Aceasta determinã o diminuare a amplificãrii diferenţiale $g'.I_p$ creşte cu numãrul de fire cuantice din structurã şi Γ de asemenea creşte cu acest numãr. Existã un numãr optim de fire cuantice pentru obţinerea unui curent de prag minim rezultat din echilibrul celor doi factori. Curentul de prag în laserul cu FC este comparabil (de mic) cu curentul de prag din laserul cu vale cuanticã cu emisie lateralã, care are curentul de prag de 0,35 mA [27] şi din cel cu laserul cu emisie verticalã care are I_p=0,7 mA [28]. Curentul de prag depinde de temperaturã dupã relaţia cunoscutã

$$J_p=J_{po}\exp(T/T_o)$$

In Fig.4.32 se reprezintã dependenţa de temperaturã calculatã pentru urmãtoarele structuri laser: (a) masiv,cu heterojonctiune dublã, T_o=104K, (b) cu vale cuanticã, T_o=285K,(c) cu fir cuantic, T_o=481K, (d) cu punct cuantic ($T_o=\infty$) [29]. Cu reducerea dimensionalitãţii purtãtorilor, scade sensibilitatea cu temperatura a curentului de prag deoarece aceasta limitează lãrgimea distribuţiei dupã energie a purtãtorilor de sarcinã. Laserii cu sensibilitate micã la temperaturã prezintã siguranţã în funcţionare, în special atunci cãnd funcţioneaza la mare putere.

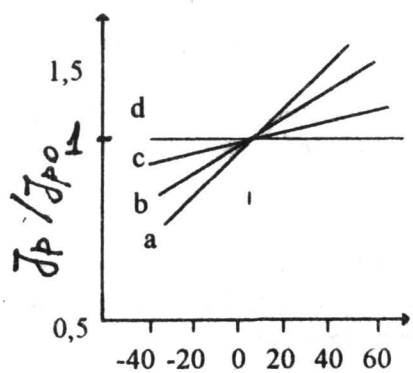


Fig. 4.32

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

4.10. *Tehnologiile de fabricare a laserilor cu fire cuantice.*

Procesul de creştere epitaxială este planar astfel că cel mai comod este să se prepare structuri cuantice planare cu heterojoncţiuni ,cum ar fi văile cuantice de potenţial. Totuşi, am văzut în paragrafele precedente că din punctul de vedere al aplicaţiilor sunt mai eficiente structurile cu fire cuantice sau cu puncte cuantice.In acest scop trebuie să se realizeze heterojoncţiuni şi în plan perpendicular pe planul de creştere. Există mai multe metode ,utilizate în acest scop, dintre care următoarle trei sunt mai eficiente: (1) decupare şi al doilea proces de creştere, (2) creşterea pe substrate care au o abatere de 2° a suprafeţei faţa de o direcţie cristalină dată,a şanumitele substraturi vicinale, (3) creşterea pe substraturi neplanare gravate.

4.10.1. *Decupare şi recreştere.*

Structura se relizează prin creşterea întîi a unei structuri cu vale cuantică convenţională până la procesul de depunere a stratului văii cuantice, inclusiv (Fig.4.33). Creşterea se face prin depunere metal-organică din stare de vapori,la presiune joasă. Apoi, prin decapare chimică umeda utilizând o mască grilă realizată cu fascicul de electroni se decupează regiunile pentru firele cuantice, în stratul activ. Apoi se creşte partea superioară a structurii laser printr-un nou proces de depunere metal-organica din stare de vapori. Firele cuantice sunt din GaInAs şi sunt înconjurate de bariere din GaInAsP. Firele au lăţimea de 30 nm şi grosimea de 10 nm. Distanţa dintre două fire (bariera) este de 40 nm. Vederea, în secţiune transversală, cu microscopul electronic cu baleiaj (scanare), SEM, după decuparea chimică este reprezentată în Fig.4.34. Se utilizează decuparea chimica umedă deoarece în acest caz apar mai puţine defecte la interfeţele firului. De asemenea, pentru reducerea defectelor termice în regiunea activă, procesul de recrestere se face la temperatura joasă (560°C). Un proces similar s-a utilizat pentru obtinerea structurii laser cu puncte cuantice cu dimensiunile laterale < 100 nm [30]. Revenind la laserul cui fire cuantice (Fig.4.33), feţele laterale sunt clivate formându-se cavitatea optică astfel încât radiaţia să se propage normal pe canelurile firelor cuantice pentru că astfel amplificarea este maximă (pentru lumina polarizată de-a lungul firului).

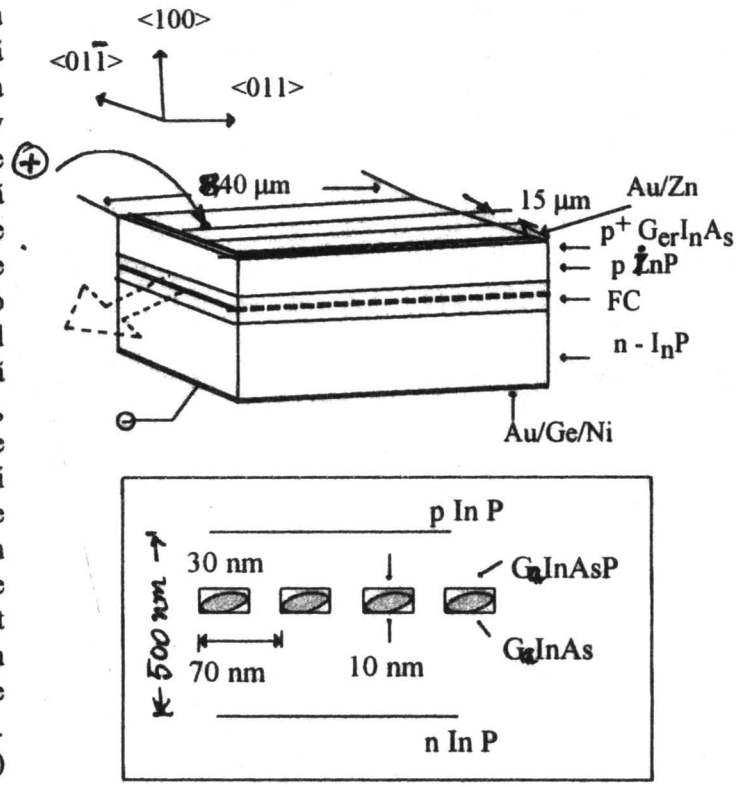


Fig. 4.33

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

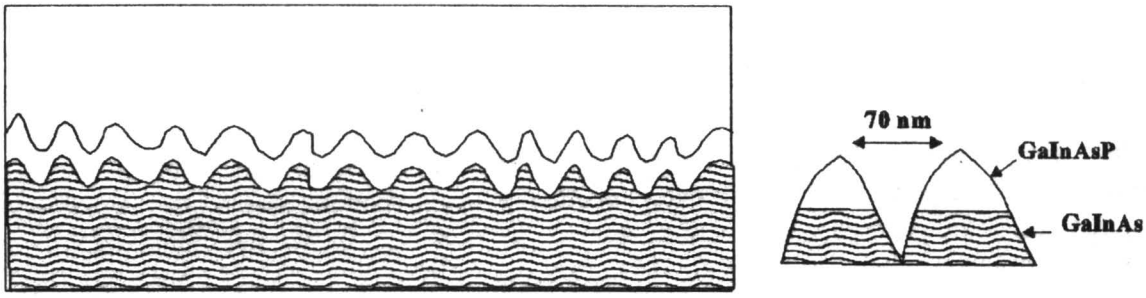


Fig. 4.34

4.10.2. *Creşterea pe substraturi vicinale.*

Creşterea structurilor laser cu fire cuantice pe straturi vicinale este mai comodã decât metoda de crestere prezentatã mai sus deoarece nu mai utilizeazã al doilea proces de creştere (de fapt de recreştere) şi nici procedeul de litografie, ceea ce face ca interfeţele firelor cuantice sã fie de calitate mai bunã [31]. O asemenea structurã este reprezentatã în Fig.4.35. Creşterea se face pe un substrat din n^+-GaAs cu suprafaţa (100) înclinatã cu 2° în direcţia [011] astfel încât apare ca o suprafaţa în trepte atomice. In anumite condiţii de creştere, nucleaţia la marginile treptelor monoatomice conduce la formarea de reţele laterale de fire cuantice, din material cu banda interzisã micã, separate prin bariere, din material cu banda interzisa mai mare. Un substrat înclinat la 2° dã o periodicitate lateralã de 8 nm. Regiunea activa a laserului constã dintr-un strat de GaAs, gros de 5 nm şi o superreţea lateralã groasa de 5 nm,crescuta prin depunerea alternativã din monostrate din GaAs si $Al_{0,25}Ga_{0,75}As$, aşa cum se observã în insertul din dreapta din Fig.4.35. Regiunea activã se aflã într-un ghid de undã din AlGaAs iar benzile metalice de contact ohmic sunt orientate perpendicular pe firele cuantice. Creşterea pe substraturi vicinale s-a obţinut atât prin metoda epitaxiei cu fascicule moleculare [32] cât şi prin depunere metal-organicã din stare de vapori [33].

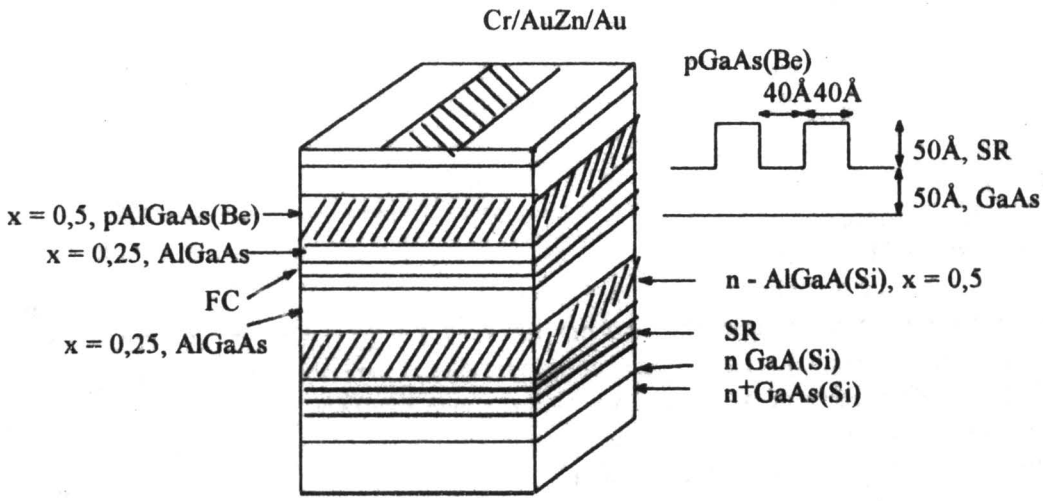


Fig. 4.35

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

4.10.3. *Creşterea pe substraturi neplanare, gravate.*

In substrat se decupeaza caneluri paralele sub forma literei V.Intr-un asemenea canel se creşte un fir cuantic, aşa cum se reprezintă în Fig.4.36 [34].In partea de jos a canelului apare un fir cuantic de 100 nm lăţime şi 10 nm grosime. Substratul are suprafaţa (100) şi marginile canelului în V sunt orientate în direcţia [01$\bar{1}$]. Ordinea straturilor depuse, care alcătuiesc ghidul de unda cu indice de refracţie gradat, este reprezentată în figură. Cititorul găseşte o sinteză asupra acestor probleme în [35].

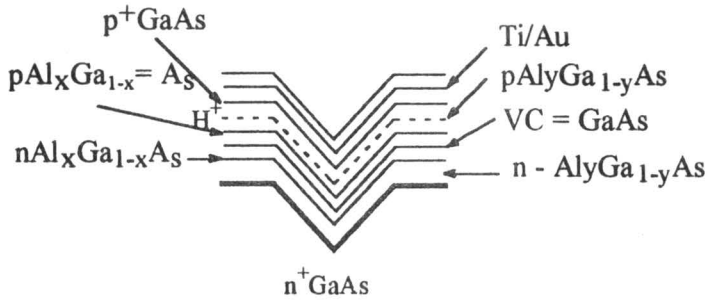
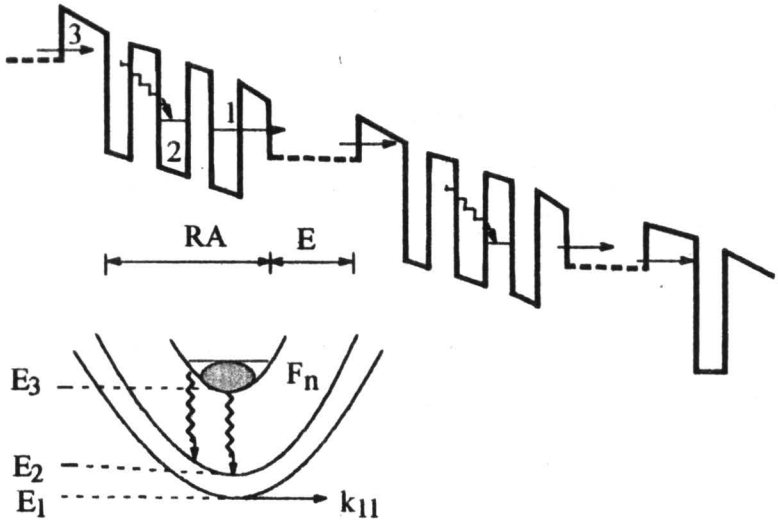


Fig. 4.36

4.11. *Laserul unipolar în cascadă.*

Acest laser diferă fundamental de laserul cu diodă prin aceea ca utilizează un singur tip de purtători de sarcină, electronii. Tranziţiile cu emisie de radiaţie au loc între stări cuantice din banda de conducţie [36-38]. Diagrama de energie a benzii de conducţie este reprezentată în Fig.4.37. Cu RA s-a notat regiunea activă şi cu E regiunea injectoare de electroni în regiunea activă. Laserul conţine 25 asemenea perioade de RA+E, alternative. Regiunea injectoare are o grosime de 18,6 nm şi conţine 6 perioade compuse fiecare dintr-o vale din GaInAs şi o barieră din AlInAs. Fiecare perioadă are grosimea de 3 nm. Grosimea straturilor barierelor din AlInAs creşte de la 40% din perioadă la 77%, de la capătul din stânga până la capătul din dreapta astfel că superreţeaua GaInAs/AlInAs apare ca un aliaj cuasicuaternar AlGaInAs cu banda interzisa variabilă. Diagrama din Fig.4.37 este reprezentată în cazul când structura este polarizată (minus la stânga, plus la dreapta). Electronii din regiunea E sunt injectaţi printr-o bariera din AlInAs de 4,5 nm grosime, pe nivelul n=3 al regiunii active. Regiunea actvă este formată din două văi cuantice din GaInAs de 0,8 nm şi,respectiv,3,5 nm grosime separate printr=o barieră de AlInAs de 3,5 nm grosime.In prima vale cuantică se găseşte nivelul n=3 iar în cea de a doua, nivelul n=2 astfel încât E_3-E_2=295 meV. Regiunea activă mai cuprinde şi a treia vale cuantică din GaInAs de 2,8 nm grosime care conţine nivelul n=1, E_2-E_1=30 meV. Aceasta este separata de cea de a doua vale printr-o barieră de 3 nm din AlInAs. Aceasta împreună cu suprapunerea spaţială redusă între stările n=3 şi n=2, asigură inversia de populaţie între aceste stări. Energia radiaţiei emise este $h\nu=E_3-E_2$ ceea ce corespunde lui λ=4,26 mm. Electronii de pe nivelul E_2 relaxează foarte rapid pe nivelul E_1, într-un timp mai mic decaât 0,6 ps, astfel că nivelul E_2 este golit şi este asigurată inversia de populaţie. Stările E_2 şi E_1 sunt puternic suprapuse. Electronul de pe nivelul E_1 tunelează rapid (într-un timp mai mic decât 0,5 ps) în următoarea regiune de injecţie. Se cresc straturi adiţionale pentru realizarea unui ghid de undă pentru radiaţia care se propagă paralel cu straturile. Construcţia completă a laserului de către firma AT&Bell este prezentată în tabela alăturată.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro



Fig, 4.37

GaInAs(dopat cu Sn) GaInAs AlGaInAs (cu E_g gradat)	$n=2.10^{20}cm^{-3}$ 1.10^{18} 1.10^{18}	d=20 nm 670 30	stratul de contact
AlInAs AlInAs	5.10^{17} $1,5.10^{17}$	1500 1000	sraturi de ghidare
AlGaInAs(cu E_g gradat) Regiunea activă GaInAs AlInAs	$1,5.10^{17}$ nedopată 1.10^{17} $1,5.10^{17}$	18,6 21,1 300 14,6	Miezul ghidului
AlGaInAs(cu E_g gradat) Regiunea activă	$1,5.10^{17}$ nedopată	18,6 21,1	↑ ×25 ↓
GaInAs AlGaInAs(cu E_g gradat)	1.10^{17} 160 $1,5.10^{17}$	300 33,2	
AlInAs Substratul din InP, n^+	$1,5.10^{17}$	500	straturi de ghidare

Structura conţine în total 500 straturi. Modul de radiaţie este polarizat normal pe straturi, conform cu regulile de selecţie pentru tranziţiile intersubbenzi. Calculul dã pentru factorul de confinare Γ valoarea 0,46 si pentru indicele de refracţie în ghidul de undã n=3,26. Ghidul de undã are largimea de 12 μm şi lungimea cuprinsã între 500 şi 720 μm. Coeficientul de reflexie la oglinzile cavitãţii este R=0,27. Contactele ohmice se aplicã pe stratul de contact de deasupra şi pe substrat. Curentul electric se aplicã în pulsuri de 20 ns cu 10^{-3} din perioadã şi spectrul de emisie se obtine cu un spectrometru de infraroşu Nicolet, care redã transformata Fourier, cu baleiere în trepte şi detecţie lock-in, utilizând un detector din HgCdTe. Pentru o cavitate cu lungimea de 500 μm, la un curent de 600 mA, spectrul de emisie este larg,indicând o emisie spontanã. Peste valoarea de 850 mA a curentului, corespunzând unei densitãţi de curent de prag de 15 kA/cm^2 la T=10K), intensitatea radiaţiei emise creşte abrupt

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

cu ordine de mărime și spectrul se îngustează foarte mult. Dacă lungimea cavității este de 720 μm, densitatea de curent de prag este de 11 kA/cm^2 la 10K și 14 kA/cm^2 la 90K. Densitatea de curent de prag se determină din relația cunoscută

$$R\exp(\Gamma G_p - \alpha_i)L = 1$$

unde $G_p = gJ_p$ este amplificarea maximă la prag și a_i este pierderea internă. Coeficientul de amplificare g s-a obținut efectuând următoarea măsurătoare independentă. Se construiește o probă identică pe un substrat izolator, pentru a elimina pierderile, însă fără straturile de ghidare. Se măsoară puterea integrală a luminescenței la densitate mare de curent. Lungimea de undă a picului spectral și lărgimea liniei sunt aceleași ca în structura laser. Din măsurarea puterii luminescenței și utilizând relația lui Einstein dintre ratele de emisie stimulată și spontană se evalueaza g la valoarea 9 cm^{-1}kA^{-1}cm^{-2}. Din relația de mai sus se poate scrie

$$J_p = \frac{\alpha_o + \alpha_i}{g\Gamma}$$

unde a_o reprezintă pierderile la oglinzi -(lnR)/L_c (=18,54 cm^{-1}) iar pierderea internă a_i =9 cm^{-1} (se datoreaza absorbției pe purtători liberi în regiunea gradată și în substrat, pierderior laterale în ghidul de undă si pierderilor plasmonice în regiunea de contact de deasupra). Se obține J_p=6,6 kA/cm^2, valoare rezonabilă cu cea măsurata, dacă se ia în considerare incertitudinea în evaluarea pierderilor.

4.12. *Diode luminescente.*

In principiu,funcționarea unei diode luminescente convenționale se bazează pe injecția purtătorilor de sarcină într-o joncțiune p-n polarizată direct [4,6]. Introducerea unei văi cuantice în regiunea activă determină o mai bună confinare a purtătorilor de sarcină cât și a fotonilor și ca urmare, crește eficiența emisiei de radiație. Pentru aplicații în procesarea semnalelor optice este necesar să se construiască diode luminescente a căror lungime de undă de emisie să poată fi controlată prin intermediul tensiunii aplicate și,în plus,să poată fi fabricate în rețele bidimensionale pe scară largă astfel încât să se poată utiliza tehnologia circuitelor integrate. Dispozitive luminescente construite până în prezent care sa satisfacă aceste cerințe sunt tranzistorul luminescent cu injecție de sarcină denumit în literatura străina CHINT (light-emitting CHarge-INjection Transistor) și dioda luminescentă cu electroni fierbinți denumită în literatura străina HELLISH (Hot Electron Light emitting and Lasing In Semiconductor Heterojinction) [39]. In cele ce urmează descriem structura și

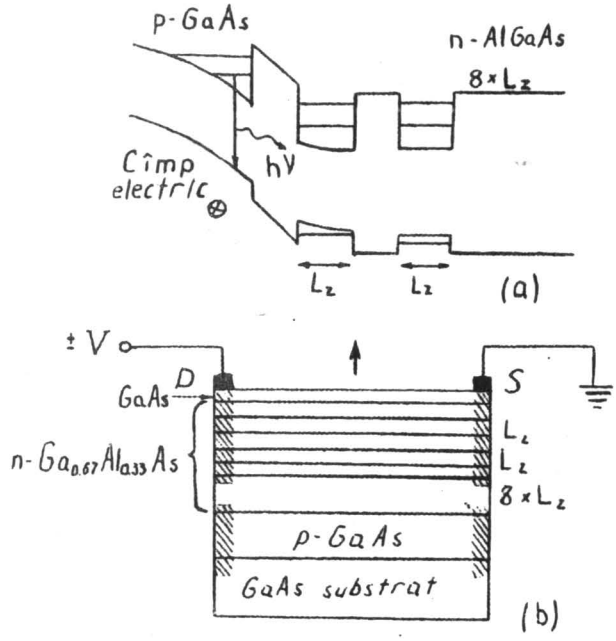


Fig. 4.38

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

funcţionarea acestuia din urmă [40]. Dispozitivul reprezentat în Fig.4.38 este o heterojoncţiune p-GaAs/n-$Al_xGa_{1-x}As$ care conţine un strat de inversiune în regiunea p şi văi cuantice din GaAs în regiune n. Pentru obţinerea structurii s-a utilizat epitaxia cu fascicule moleculare. Contactele ohmice, sursă (S) şi drenă (D) s-au obţinut prin difuzia de Au/Ge/Ni în toate straturile, asa cum se reprezintă prin zona hasurată pe figură. Spectrul de electroluminescenţă se reprezintă în fig.4.39. La câmp electric slab apare un pic la $h\nu_1$=1,51 eV care corespunde recombinării electron-gol în stratul de inversiune. La câmp electric mai mare apare un al doilea pic, la $h\nu_2$=1,58 eV, a cărui intensitate creşte mai rapid cu creşterea câmpului electric decât în cazul primului pic. Cel de al doilea pic corespunde recombinării e1-hh1 din valea cuantică. Prin aplicarea unei tensiuni externe între sursă si drenă, câmpul electric este paralel cu straturile. Atât electronii din valea cuantica si din stratul de inversie cât şi golurile din regiunea p, devin "fierbinţi" prin creşterea temperaturii acestora deasupra temperaturii reţelei in câmp electric intens. Deoarece golurile au masă efectivă mai mare temperatura lor este apreciabil mai mică decât a electronilor. Electronii fierbinţi din valea cuantică adiacentă joncţiunii plane sunt injectaţi în stratul de inversie prin injecţie termică sau prin tunelare, aşa cum se reprezintă in Fig.4.40. Acumularea de sarcină electrică negativă în stratul de inversie induce o modificare a jonctiunii. Electronii injectaţi recombină cu golurile şi se emite radiaţie de energie $h\nu_1$ corespunzătoare tranziţiei interbenzi din GaAs. Cu creşterea câmpului electric aplicat creşte curentul de electroni fierbinţi în stratul de inversie. Electronii de neechilibru din stratul de inversie se încălzesc sub acţiunea câmpului si ocupă stări energetice superioare, conform distribuţiei Fermi-Dirac. Astfel, luminescenţa din stratul de inversie prezintă o coadă la energii mai mari. Insă, deoarece lumina emisă este colectată la suprafaţa probei ,fotonii care au energie suficient de mare sunt reabsorbiţi în văile cuantice şi reemisi la o energie coresounzătoare tranzitiei e1-hh1, tranziţias $h\nu_2$. Cu creşterea câmpului aplicat creşte concentraţia purtătorilor injectati şi ocuparea cu electroni a stărilor de energie mai mare în stratul de inversie ceea ce determină creşterea numărului de fotoni de energie mai mare ce pot fi absorbiţi în văile cuantice. Ca urmare, intensitatea radiaţiei reemise la $h\nu_2$ creşte rapid cu creşterea câmpului aplicat aşa cum se observă pe Fig.4.39. Prin introducerea în structură a unor văi cuantice de lărgimi diferite, se obţin diverse energii de tranziţie e1-hh1 şi deci structura poate funcţiona la mai multe lungimi de undă. In încheiere menţionăm ca emisia

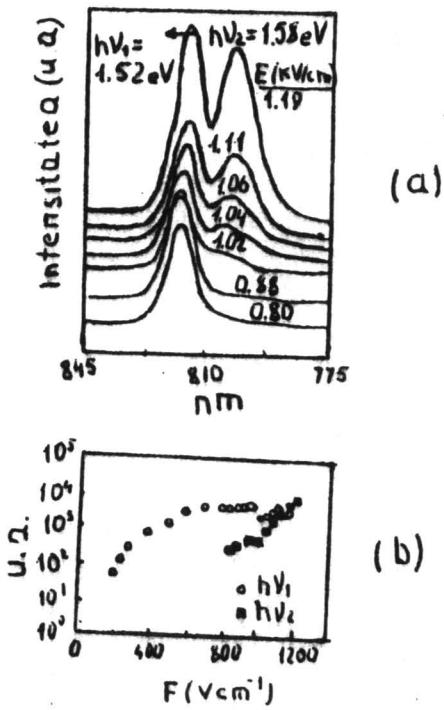


Fig. 4.39

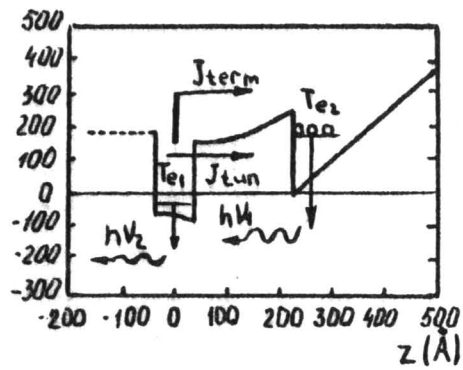


Fig. 4.40

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

luminii în aceastã structurã, prezentatã mai sus este independentã de polaritatea tensiunii aplicate, intensitatea luminii emise este o funcţie SAU-EXCLUSIV de tensiunea electricã de intrare, ceea ce îi confera dispozitivului posibilitatea aplicãrii în circuitele logice.

Bibliografie.

1. I.Haiashi, IEEE Trans.Electron Devices,ED-31,1630(1984).
2. F.Stern, IEEE J.Quantum Electron.QE-9,290(1973).
3. G.H.B.Thomson, Physics of Semiconductor Lasers, John Wiley, Chichester,1980.
4. H.Kressel, J.K.Butler, Semiconductor lasers and heterojuntion LED's, Academic Press,1977.
5. H.C.Casey, M.B.Panish, Semiconductor lasers, Academic Press,1980.
6. V.Dolocan, Fizica electronicã a stãrii solide, Ed.Academiei Romane,1984.
7. L.W.Molenkamp,H.V.J.Van't Blik, J.Appl.Phys. 64,4253(1988).
8. G.W.'t Hooft, C.van Optorp, A.T.Vink, Acta Electronica, 25,193(1983).
9. P.Blood în Physics and technology of heterojunction devices, ed.P.V. Morgan, N.Parkman, K.Overshott, Peter Peregrinus Ltd., London,1991.
10. J.Nagle, C.Weisbuch în Science and Engineering of 1 and 0 Dimensional Semiconductor Systems, ed.C.M.Sotomayor-Torres, S.P.Beaumont, Plenum, New-York, 1990.
11. M.Asada, A.Kameyassa, Y.Suematsu, IEEE J.Quantum Electron.QE-20, 745 (1984). T.Makino, IEEE J.Quantum Electron.32,493(1996).
12. N.Yamada, S.Ogita, M.Yamagishi, K.Tabata, IEEE J. Quantum Electron.QE-21, 640 (1985).
13. A.I.Kucharska, D.J.Robins, IEEE J.Quqntum Electron. QE-26.443(1990).
14. P.W.A.Mellroy, A.Kurobe, Y.Uematsu, IEEE J. quantum electron. QE-21, 1958 (1985).
15. J.P.Noblanc, Surf. Sci.168, 847 (1986).
16. P.S.Zory et al, Electron. Lett.22,475(1986).
17. P.Blood, A.I.Kucharska, C.T.Foxon, G.Griffiths, Appl. Phys. Lett.55,1167(1989)
18. P.Blood, E.D.Fletcher, C.T.Foxon, Appl.Phys.Lett. 53, 299 (198).
19. T.C.Chang, C.G.Fonstod, IEE J.Quantum Electron.QE-25, 171 (1989).
20. P.K.York, K.J.Beernink, J.Kim, J.Coleman, G.E.Fernandez, C.M.Wayman, Appl.Phys. Lett. 55, 2476 (1989); Semic. Sci.Tech. 5, 508 (1990).
21. D.F.Welch,W.Steifer,C.F.Schaus,C.F.Suns,P.L.Gourley,Appl.Phys.Lett.56,10(1990).
22. W.T.Tsang, IEEE J.Quantum Electron.QE-20, 1119 (1984).
23. H.D.wolf, H.Lang, L.Korte, Electron. Lett. 25, 1246 (1989).
24. J.R.Shealy, Appl. Phys. Lett. 50, 1634 (1987).
25. M.Kao, Y.Miyake, S.Tamura, H.Harayama, S.Arai, Y.suematsu, Y.Myiamoto, Trans. IEICE, E73, 63 (1990).
26. M.Asada, Y.Miyamoto, Y.Suematsu, Japan. J.Appl.Phys. 24, L95 (1985).
27. E.Kapon, S. Simhony, J.P.Harrison, L.T.Florez, P.Worland, Appl.Phys. Lett. 56, 1828 (1990).
28. R.S.Geels, L.A.Coldren, Appl. Phys. Lett. 57, 1605 (1990).
29. Y, Arakawa, H.Sakaki, Appl. Phys. Lett. 40, 939 (1982).
30. Y.Miyamoto, M.Cao, Y.Shingai, K.Furuya, Y.Suematsu,, K.G.Ravikumor, S.Arai, Japan. J.Appl.Phys. 26, L225 (1987).
31. P.M.Petroff, A.C.Gossard, W.Wiegmann, Appl. Phys. Lett. 45, 621 (1984).
32. J.M.Gaines, P.M.Petroff, H.Kroemer, R.J.Simes, R.S.Geels, J.H.English, J.Vac.Sci. Technol. B6, 1378 (1988).
33. T.Fukui, H.Saito, Japan. J. Appl. Phys. 29, L731 (1990).
34. E.Kapon, D.Hwang, R.Bhat, Phys. Rev. Lett. 63, 430 (1989).
35. E.Kapon în Quantum well lasers, ed. P. S. Zory, Academic Press, 1993.
36. R.F.Kazarinov, R.A.Suris, Sov. Phys. Semicond. 5, 207 (1971).
37. F.Capasso, K.Mohamed, A.Y. Cho, IEEE J.Quantum. Electron. 22, 1853 (1986).
38. A.Kastalsky, V.J.Goldman, J.Abeles, Appl. Phys. Lett. 59, 2636 (1991).
39. A.daCunha, R.Gupta, A.Straw, V.Balkan, B.K.Ridley, Semicond. Sci.Technol. 9, 677 (1994).
40. N.Balkan et al, Appl.Phys. Lett. 67, 935 (1995).

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Capitolul V

Detectori de radiaţie în infraroşu

5.1. *Consideraţii generale.*

Pentru detecţia radiaţiei infraroşii se utilizează detectorii fotonici,detectorii termici, detectorii piroelectrici, celula Golay, etc [1-4]. Detectorii fotonici funcţionează pe baza generării purtătorilor de sarcină de neechilibru de către radiaţia electromagnetică absorbită. Lungimea de undă maximă de prag a radiaţiei ce poate fi detectată în cazul când fenomenul de detecţie se bazează pe generarea de perechi electron-gol în semiconductor (Fig.5.1a) se determină din relaţia λ_o=hc/E_g unde h este constanta lui Planck c-viteza luminii în vid,E_g-lărgimea benzii interzise a semiconductorului. In cazul când fenomenul de detecţie se bazează pe generarea unui singur tip de purtători de sarcină (Fig.5.1,b,c) lungimea de undă de prag se determină din relăaţia λ_o=hc/E_i unde E_i este energia de activare a impurităţilor. Intr-un sistem practic de unităţi relaţiile de mai sus se scriu λ_o(μm)=1,24/E_o(eV). In Tabela 1.1 se prezintă lungimile de undă de prag pentru unii detectori convenţionali care funcţionează îm imfraroşu şi temperaturile de funcţionare [1].

Tabela 1.1.

Materialul	T,K	E_o,eV	λ_o,μm
Ge:B	4,2	0,0115	108
Ge:Ga	4,2	0,012	104
Ge:Cu	4,2	0,0537	23
Ge:Hg	4,2	0,0537	23
Ge:Au	77	0,207	6
Si:Sb	4,2	0,043	29
Si:B	4,2	0,0439	28
Si:P	4,2	0,045	28
Si:As	4,2	0,0537	23
Si:Al	4,2	0,0685	18
Si:Bi	4,2	0.0706	18
Si:Ga	4,2	0,0723	17
Si:Zn	77	0,155	8
CdTe	295	1,50	0,83
GaAs	295	1,45	0,92
Si	295	1,12	1,1
Ge	295	0,67	1,8
PbS	295	0,42	2,9
PbSe	295	0,23	5,4
InAs	295	0,39	3,2
InSb	77	0,32	5,4
$Pb_{0,2}Sn_{0,8}Te$	77	0,1	12
$Hg_{0,8}Cd_{0,2}Te$	295	0,1	12

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

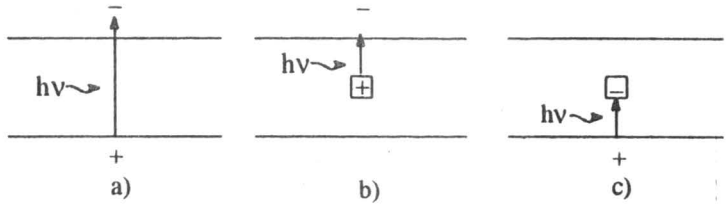


Fig. 5.1

Când se utilizează pentru detecţia în atmosferă, cea mai bună sensibilitate o au detectorii care funcţionează în domeniul 8-14 μm, unde există fereastra atmosferică (adică absorbţia minimă de către gazele care intră în compoziţia acesteia). La detecţia radiaţiei transmise prin fibre optice (în cazul comunicaţiilor la distanţă) se utilizează detectori (ca şi sursele de radiaţie) care funcţionează în domeniul de lungimi de undă în care fibrele optice au pierderi minime de transmisie (1,3-1,6 μm; 0.9 μm). Din Tabela 1.1 se observă că detectorii bazaţi pe generarea extrinsecă (a unui singur tip de purtători de sarcină) nu pot funcţiona la temperatura camerei, deoarece la această temperatură impurităţile care dau nivele locale puţin adânci sunt complet ionizate şi nu mai poate avea loc procesul de absorbţie dorit. La temperatura camerei pot fi utilizaţi detectorii de infraroşu construiţi din semiconductori cu bandă interzisă îngustă, în care are loc generarea perechilor electron-gol prin absorbţia bandă-bandă, cum ar fi compusul ternar $Hg_{1x}Cd_xTe$ care pentru x=0,2 are E_g=1,1 eV şi λ_o=12 μm. Insă, din punct de vedere tehnologic sunt mai greu de preparat semiconductorii cu banda interzisă îngustă,decât semiconductorii cu banda interzisa largă. Aceste dificultăţi au motivat studiul văilor cuantice de potenţial pentru detecţia în infraroşu, care se construiesc din semiconductori cu banda interzisă largă. La absorbţia în infraroşu tranziţiile au loc între subbenzi (sau nivele) din valea cuantică de potenţial. Tranziţiile se numesc intersubbenzi sau intrabandă (în interiorul aceleiaşi benzi,de conductie sau de valenţă). Deoarece $h\nu<E_g$, pentru ca absorbţia să aibă loc este necesar ca văile cuantice de potenţial să fie dopate: valea cuantică pentru electroni (din banda de conducţie) se dopează de tip n iar valea cuantica pentru goluri (din banda de valenţă) se dopează de tip p. Mecanismul de absorbţie în infraroşu constă în excitarea unui electron (sau gol) de pe starea fundamentală din banda de conducţie (sau de valenţă) a văii cuantice dopate pe o stare excitată, neocupată,din aceeaşi bandă (Fig.5.2). Pentru a funcţiona ca detector de infraroşu structura cu văi cuantice este proiectată astfel ca electronii excitaţi sa poată ieşi din valea cuantică (de exemplu prin efect tunel, Fig.5.2b) şi să fie colectaţi ca un curent fotoelectric. Avantajul detectorilor de infraroşu cu văi cuantice faţă de cei cu semiconductori extrinseci,în care are loc generarea unui singur tip de purtatori de sarcină,constă în aceea ca parametrii vaii cuantice pot fi proiectaţi astfel încât să se obtină spectrul optic dorit (lungimea de undă a

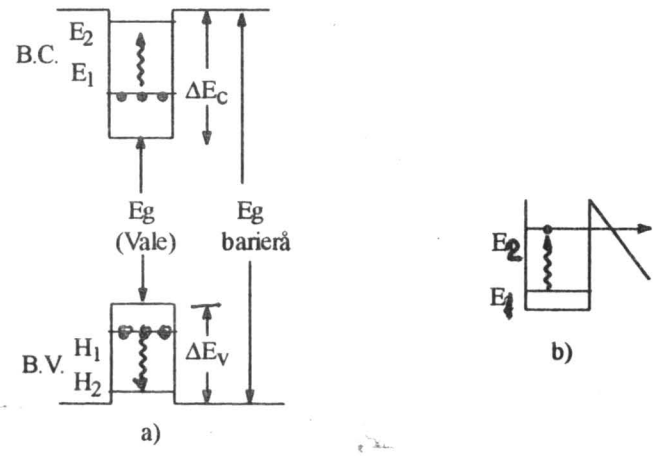


Fig. 5.2

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

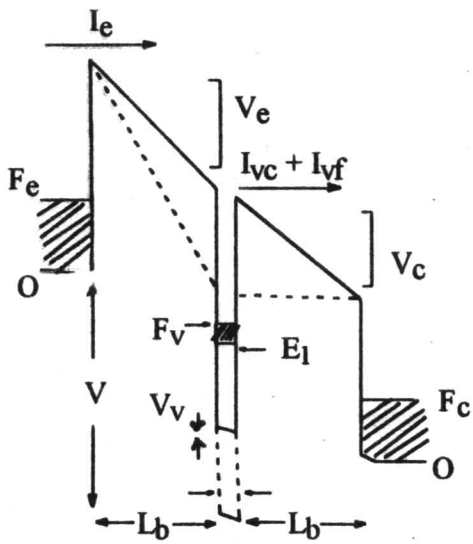


Fig. 5.3

maximului de absorbţie şi lărgimea spectrală), pe când energia de ionizare a unei impurităţi este fixă într-un semiconductor dat. In plus, deoarece dimensiunea văii cuantice este cu unul sau două ordine de mărime mai mare decât dimensiunea unui atom de impurităţi, momentul de dipol al tranziţiei optice <x> (paragraful 3.4) este mult mai mare în cazul văilor cuantice.Totuşi, absorbţia optică într-un singur strat subţire (o singură vale cuantică) este mică (<1%) iar probabilitatea ca electronul sa iasă din valea de potenţial, adâncă, este de asemenea, mică. Acest dezavantaj a fost înlăturat prin utilizarea unor structuri multiple de văi cuantice astfel ca structura sa aibă grosime suficient de mare pentru ca întreaga radiaţie să fie absorbită [5]. Intr-o superreţea cu 50 văi cuantice s-a obţinut forţa oscilatorului aproximativ egală cu unitatea [6]. Primul detector în infraroşu cu văi cuantice multiple a fost construit în anul 1987 [7] şi avea responsivitatea R=0,52 A/W la λ=10,8 μm. Performanţe şi mai bune s-au obţinut prin realizarea unui cuplaj optic între reţele de asemenea structuri [8,9]. In afara detectorilor care funcţionează pe baza tranziţiilor între stări legate din aceeaşi bandă s-au construit şi detectori de infraroşu care funcţionează pe baza tranziţiilor între stările legate şi stările din spectrul continuu sau cuasicontinuu de energie a electronilor,din aceeaşi bandă.S-au construit detectori în domeniul de lungimi de undă 3-20 μm utilizând diverşi compuşi III-V ca GaAs/AlGaAs, InGaAs/InP, InGaAsP/InP, GaAs/GaInP, GaAS/AlInP. Lungimile de undă corespunzătoare maximelor spectrului detectat cu anumite structuri cu multiplu de văi cuantice sunt prezentate în Tabela 1.2.

Tabela 1.2

Materialul	λ,μm
$GaAs/Al_{0,25}Ga_{0,75}As$	10,9
$In_{0,53}Ga_{0,47}As/In_{0,52}Al_{0,48}As/InP$	4
InGaAsP/InP	8-12
$GaAs/Al_{0,5}In_{0,5}P$	3
$In_{0,15}Ga_{0,85}As/GaAs$	15
$GaAs/Ga_{0,5}In_{0,5}P$	8
$In_{0,53}Ga_{0,47}As/InP$	8

Vom prezenta în cele ce urmează detectorii cu o singură vale cuantică,cu un multiplu de văi cuantice (rectangulare sau asimetrice), cu minibenzi, cuplajul optic folosind împrăştierea aleatorie sau reţele optice, senzori de imagine.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

5.2. *Detectori cu o singură vale cuantică de potenţial.*

S-au realizat detectori cu o singură vale cuantică dopată de tip n (deci pentru electroni) [10-12], dopată de tip p (deci pentru goluri) [13] şi cu o singură vale cuantică pentru electroni, nedopată; în aceasta din urmă, injecţia de electroni pe subbanda fundamentală din valea cuantică are loc prin tunelarea acestora din emitor printr-o barieră de potenţial subţire. Vom discuta în continuare aceste trei cazuri. Diagrama de benzi de energie a fotodetectorului cu o singură vale cuantică este reprezentată în Fig.5.3, iar geometria probei este reprezentată în Fig.5.4 (de fapt în această figură este prezentată o structură cu un multiplu de văi cuantice). Valea cuantică de potential cu aria $A=3,1.10^{-4}cm^2$ cu grosimea $L_v=4$ nm este din GaAs depus prin epitaxie cu fascicule moleculare (EFM) dopat cu donori de concentraţie $N_D=10^{18}cm^{-3}$. Ea se găseşte între două bariere, fiecare de grosime $L_b=50$ nm, din $Al_{0,27}Ga_{0,73}As$ crescute de asemenea prin EFM. Cele două bariere sunt flancate de câte un strat de GaAs-n^+ pentru contactul ohmic.Structura este depusă pe un substrat tăiat la 45° faţă de normala la suprafaţa stratului văii cuantice (iluminarea se face prin spatele structurii,prin acest substrat). Această înclinare permite ca să cadă câmpul electric apropae normal pe suprafaţa stratului văii cuantice (paragraful 3.4).Revenind la Fig.5.3, la o tensiune V aplicată pe întreaga structura (adică între contactul emitor şi cel colector) prin aceasta va circula un curent electric. Tensinunea totală V se divide în trei părţi $V=V_e+V_v+V_b$,unde V_e este căderea de tensiune pe bariera de la emitor, V_v este căderea de tensiune pe valea cuantica iar V_c este căderea de tensiune pe bariera de la colector. Intre curenţii care circulă prin joncţiune există relaţia

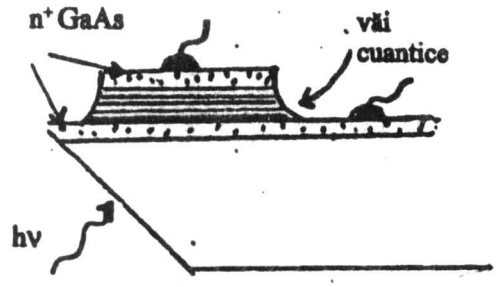


Fig. 5.4

$$I_e(V_e)=I_{vc}(V_c)+I_{vf}(V_c) \qquad (2.1)$$

$I_e(V_e)$ este curentul de injecţie prin emisie în câmp din emitor.Curentul I_v generat de valea de potenţial are două componente,o componentă de emisie în câmp $I_{vc}(V_c)$ şi componenta fotoelectrică $I_{vf}(V_c)$. La relaţia (2.1) dintre curenţi se adaugă următoarea relaţie între tensiuni

$$q(N_D-n)L_vA=C(V_e-V_c)=2C_vV_v \qquad (2.2)$$

$$V=V_e+V_v+V_c$$

$C=\varepsilon A/L_b$ este capacitatea emitorului (şi colectorului),$C_v=\varepsilon A/L_v$ este capoacitatea văii cuantice. Curentul de emisie de la emitor I_e (tridimensional) este dat de expresia

$$I_e(V_e)=\frac{qm^*kTA}{2\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty T_e(E,V_e)\ln[1+e^{(E_{F_e}-E)/kT}]dE \qquad (2.3)$$

iar curentul de emisie în câmp din valea cuantică I_{vc} (bidimensional) este dat de expresia

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$I_{vc}(V_c) = \frac{qm^*A}{\pi\hbar^2 l} v(Vc) \int_{E_1}^{\infty} T_c(E, V_c)[1 + e^{(E-E_1-E_{Fv})/kT}]^{-1} dE \qquad (2.4)$$

unde $l=L_b+L_v$ iar E_{Fe} este nivelul Fermi al electronilor din emitor (relativ la marginea inferioară a benzii de conducţie) iar E_{Fv} este nivelul Fermi din valea cuantică (relativ la energia stării fundamentale E_1). Coeficienţii de transmisie prin barierele de la emitor şi de la colector $T_e(E,V_e)$ si $T_c(E,V_c)$ sunt dependenţi de energia electronului iar viteza electronului in colector este dată de expesia

$$v(V_c) = \frac{\mu F_c}{\sqrt{1 + (\frac{\mu F_c}{v_s})^2}} \qquad (2.5)$$

unde F_cV_c/l este câmpul electric la colector iar v_s este viteza de saturatie. Expresiile (2.3) şi (2.4) sunt pentru curenţii de electroni care se deplasează de la emitor la colector.Există si curenţi corespunzători,de sens invers,dar aceştia sunt neglijabili în condiţiile de polarizare considerate. Diagrma de benzi de energie a structurii, în prezenţa iluminării, este reprezentată cu linie întrerupta în Fig.5.3. Curentul fotoelectric este dat de expresia

$$I_f = n_f q v A \qquad (2.6)$$

unde n_f este numărul de purtători pe cm^3 generaţi de radiaţie iar v este viteza lor de transport. Rata de generare optică este η_a Pcosθ/ hν unde η_a este eficienţa cuantică de absorbţie, Pcosθ este puterea optică incidentă pe aria activă, A, a detectorului la unghiul θ. Se poate scrie

$$n_f = \frac{1}{Al} \frac{\eta_a P\cos\theta}{h\nu} p_e \tau \qquad (2.7)$$

unde p_e este probabilitatea ca electronul să iasă din valea cuantică de potenţial iar τ este timpul de recaptură a electronului pe nivelul de pe care a fost excitat (este analogul timpului de viaţă). Dacă se defineşte responsivitatea la lungimea de undă de pic al spectrului de absorbţie λ_p,$R_p=I_f/P\cos\theta$,rezultă

$$R_p = \frac{q}{h\nu} \eta_a p_e g \qquad (2.8)$$

unde

$$g = \frac{v\tau}{l} = \frac{\tau}{t_T} = \frac{L}{l}$$

este amplificarea într-un fotoconductor, $L=v\tau$ este drumul liber mijlociu al electronului, t_T este timpul de tranzit, l este grosimea detectorului. Mărimea,

$$\eta_a = (1 - e^{-2\alpha l})/2$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

este eficienţa cuantică de absorbţie în condiţii de nepolarizare. Factorul 2 la numitor apare datorită regulilor de selecţie din mecanica cuantică care permit numai absorbţia radiatiei polarizată in planul de incidenţă. Produsul $\eta_a p_e = \eta$ = eficienţa cuantică netă. In Fig.5.5 este reprezentat curentul de întuneric $I_i = I_{vc}$ la 77K şi 12 K şi curentul fotoelectric la 12 K. Cu linie plină sunt reprezentate rezultatele experimentale iar cu linie întreruptă sunt reprezentate curbele teoretice. Se observă o bună concordanţă între teorie şi experienţă. Curbele teoretice sunt reprezentate numai pentru curentul de întuneric. Din concordanţa dintre curbele experimentale şi cele teoretice rezultă pentru mobilitatea şi viteza electronilor valorile μ=3000 $cm^2/Vs, v_s=10^7$ cm/s la T=12K şi μ=2000 $cm^2/Vs, v_s=5.10^6$cm/s la 77K. Spectrul responsivităţii este reprezentat în Fig.5.6 şi are valoarea maximă R_p=0,325A/W la λ_p=7.4 μm. Profilul spectrului lui R nu se modifică cu modificarea tensiunii de

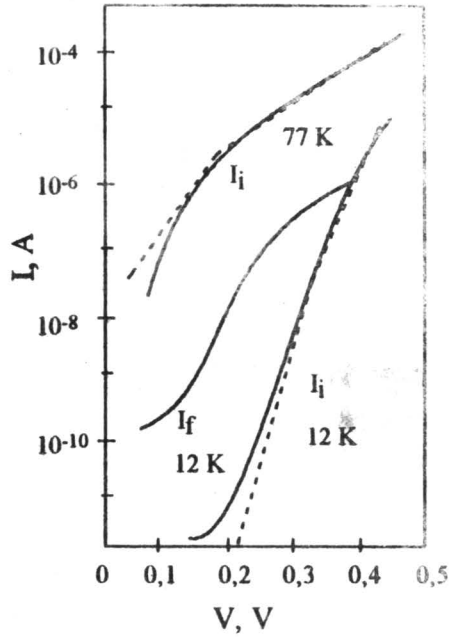


Fig. 5.5

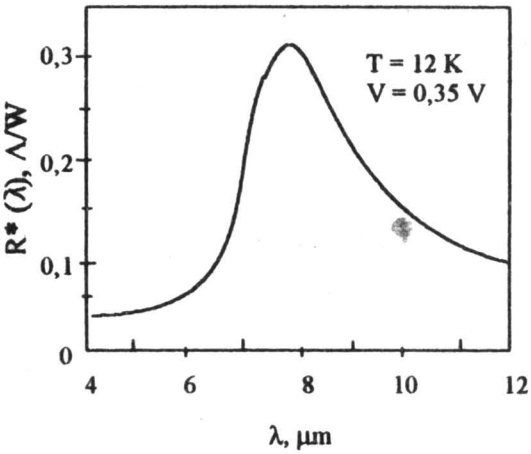
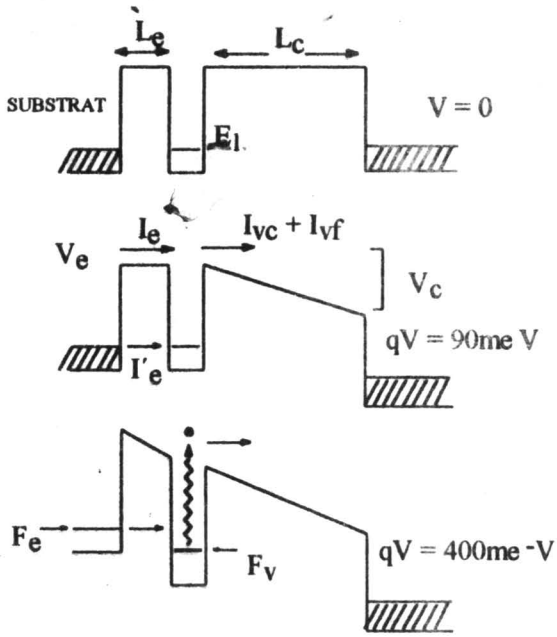


Fig. 5.6



Fig, 5.7

polarizare însă valoarea maximă R_p depinde de tensiunea de polarizare, prezentând un maxim la o anumită valoare a tensiunii. Prezentăm în continuare detectorul cu o singură vale cuantică, nedopată, în care umplerea stării fundamentale, E_1, cu electroni are loc prin tunelarea acestora din emitor, printr-un strat de barieră subţire, în valea cuantică. Diagrama de benzi de energie a structurii este reprezentată în Fig.5.7 [14,15]. Pe un substrat semiizolator din GaAs se creşte un strat de grosime 1μm din GaAs dopat cu $N_D=1,3.10^{18}cm^{-3}$ pentru contactul ohmic. Peste acesta se creşte un strat de $Al_{0,27}Ga_{0,73}As$ cu grosimea L_e=15,5 nm care constituie bariera emitor, apoi peste el se creşte un strat de GaAs nedopat,cu grosimea L_v=4,2 nm,

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

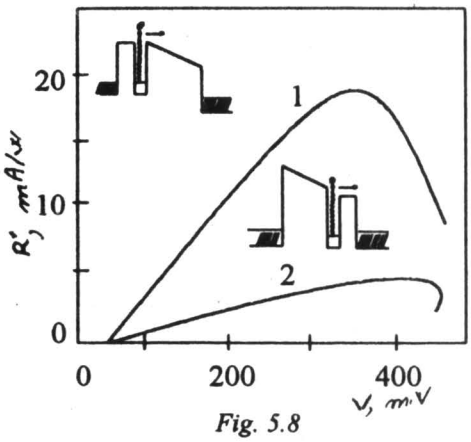


Fig. 5.8

care constituie valea cuantică de potenţial. Peste acest strat se creşte un alt strat de $Al_{0,27}Ga_{0,73}As$ cu grosimea L_c=50 nm, care constituie bariera colector, peste care se creşte un strat de GaAs cu N_D=0,5 μm,care constituie al doilea strat de contact. In fig.5.8 se reprezintă dependenţa de tensiunea de polarizare a maximului responsivităţii la λ_p=8 μm, la polarizare directă (curba 1) şi la polarizare inversă (curba 2). Se observă că responsivitatea la polarizare directă (când electronii din contactul emitor pot tunela uşor prin bariera de potenţial subţire, de grosime L_e, astfel că densitatea de electroni în valea cuantică este mare) este apropae cu

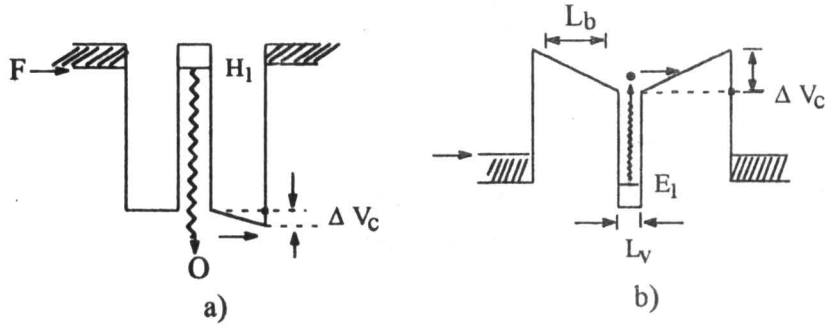


Fig. 5.9

un ordin de mărime mai mare decât la polarizare inversă (când electronii trebuie să tuneleze prin bariera de potenţial groasă, de grosime L_e, astfel că densitatea de electroni în valea cuantică este mică). In finalul acestui paragraf prezentăm detectorul cu o singură vale cuantică, de tip p, dopată. Diagrama de benzi de energie a structurii este prezentată în Fig.5.9a [16]. Pe un substrat semiizolator de GaAs se depune un strat de GaAs de tip p de grosime 1 μm, pentru contactul ohmic. Peste acesta se depune un strat de barieră cu L_b=30 nm din $Al_{0,3}Ga_{0,7}$ As nedopat peste care se depune stratul văii cuantice cu L_v= 4 nm din GaAs de tip p (p=$2.10^{18}cm^{-3}$, cu atomi acceptori din Be), peste care se depune un al doilea strat de barieră identic cu primul şi peste acesta se depune un al doilea strat de Gaas de tip p, pentru contactul ohmic, de 0,5 μm grosime. In structura de tip p iluminarea se face la incidenţă normală deoarece mixarea între golurile grele si cele uşoare la k≠0, face ca această geometrie să fie optimă. In Fig.5.10 este reprezentată responsivitatea în funcţie de tensiunea de polarizare pentru detectorul cu o singură vale de

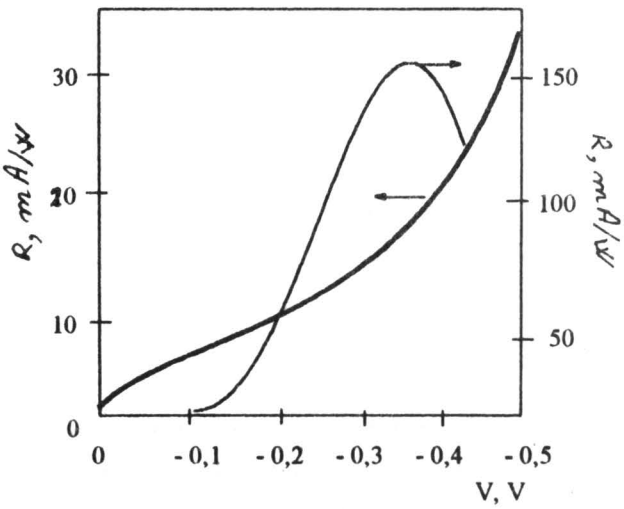


Fig. 5.10

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

potenţial de tip p dopată (cu linie plină). Pentru comparaţie, cu linie întreruptă este reprezentată responsivitatea detectorului cu o singură vale de potenţial de tip n, dopată. Se observă ca spre deosebire de valea de tip n unde R prezintă un maxim la o anumită tensiune de polarizare, în valea de tip p, R creşte continuu cu creşterea tensiunii de polarizare. Aceasta se datorează faptului că în valea cuantică de tip n amplificarea g prezintă un maxim în funcţie de tensiunea aplicată, pe când în valea cuantică de tip p aceasta creste continuu. Aşa cum se observă pe Fig.5.9 în valea de tip n există o înclinare mult mai mare a barierelor (Fig.5.9b) faţă de valea de tip p (Fig.5.9a).Aceasta se datorează faptului că masa efectivă a golurilor este mai mare decât masa efectivă a electronilor şi energia stării fundamentale a golurilor H_1=25 meV este mai mica decât energia stării fundamentale a electronilor E_1=88 meV (Fig.5.9 a,b). Ca urmare, alinierea nivelelor Fermi din valea cuantică, emitor şi colector, necesită o înclinare mai mare a benzilor în cazul E_1 decât în cazul H_1.

5.3. *Detectori cu un multiplu de văi cuantice.*

Un detector cu văi cuantice multiple constă din 50 de perioade de văi din GaAs dopat n (N_D=1,4.10^{18}cm^{-3}) cu L_v=4,5 nm şi bariere din $Al_{0,25}Ga_{0,75}As$ cu L_b=9,5 nm, flancate, de o parte şi de alta, cu straturi de contact din GaAs-n$^+$ (pentru contactul ohmic), aşa cum se reprezintă în Fig.5.4 [17]. Structura se creşte epitaxial pe un substrat din GaAs semiizolator, tăiat la 45°, astfel ca lumina să fie incidentă pe structură sub acest unghi.Grosimile văilor si compoziţia au fost alese astfel încât într-o vale cuantică să existe două stări legate separate printr-un interval energetic corespunzător unei lungimi de undă de aproximativ 10 μm. Coeficientul de absorbţie are valoarea maximă la λ_p=10,9 μm (Fig.5.11). După absorbţia fotonilor, purtătorii excitaţi pot fi transportaţi fie paralel cu planul văii cuantice, fie perpendicular pe aceasta, prin aplicarea unui câmp electric în direcţie corespunzătoare. Transportul perpendicular este superior transportului paralel deoarece în primul caz mobilitatea electronilor de pe stările excitate este mult mai mare decât mobilitatea electronilor de pe stările legate şi răspunsul fotoelectric este mult mai mare. In plus, curentul de întuneric este mult mai mic deoarece în acest caz heterojoncţiunea blochează efectiv transportul electronilor pe starea fundamentală din valea cuantică dopată. De aceea detectorii de radiaţie funcţionează pe baza transportului purtătorilor de sarcină perpendicular pe straturile semiconductoare. Pentru obţinerea curbei reprezentată în Fig.5.11 s-a utilizat un laser cu CO_2 acordabil de la 10,8 la 9,2 μm. Puterea laserului a fost atenuată astfel încât pe suprafaţa activă a dispozitivului să cadă o putere mai mică de 10 μW. Fotocurentul este reprezentat pe Fig.5.11 cu puncte. El are aceeaşi dependenţă de lungimea de undă ca şi absorbţia. Tensiunea fotoelectrică s-a măsurat pe o rezistenţă de sarcină de 10 Ω. Semnalul fotoelectric depinde de polarizarea luminii,el fiind maxim atunci când câmpul electric al undei este perependicular pe stratul văii cuantice

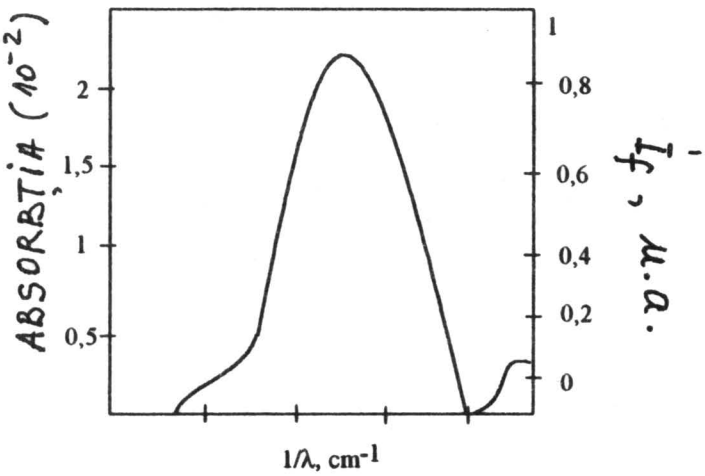


Fig. 5.11

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

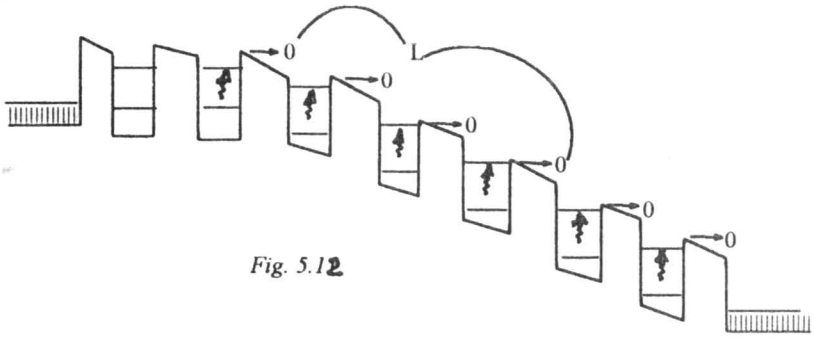


Fig. 5.12

(cap.3). Regula de selecţie de polarizare $\alpha \sim \cos^2\phi$, unde ϕ este unghiul dintre câmpul electric al undei și direcţia x normală pe planul paralel cu straturile superreţelei,se verifică cu bună aproximaţie. Absorbţia se anulează la $\phi=90°$, adică pentru lumina polarizată în planul paralel cu stratul văii cuantice. Această regulă de selecţie se poate verifica și altfel.Se lucrează cu lumina polarizată în planul de incidenţă (polarizarea p) și se variază unghiul θ de incidenţă al fascicolului. Absorbţia urmează legea $\alpha \sim T(\theta)\sin^2\theta/\cos\theta$ unde $T(\theta)$ este coeficientul de transmisie prin semiconductor. Absorbţia radiaţiei de infraroșu datorită tranziţiilor intersubbenzi dintr-o stare fundamentală legată într-o stare excitată legată este urmată de tunelarea electronilor excitaţi de catre radiaţie, în afara văilor cuantice (Fig.5.12). Acești purtători, excitaţi optic, care tunelează din văile cuantice sunt transportaţi de

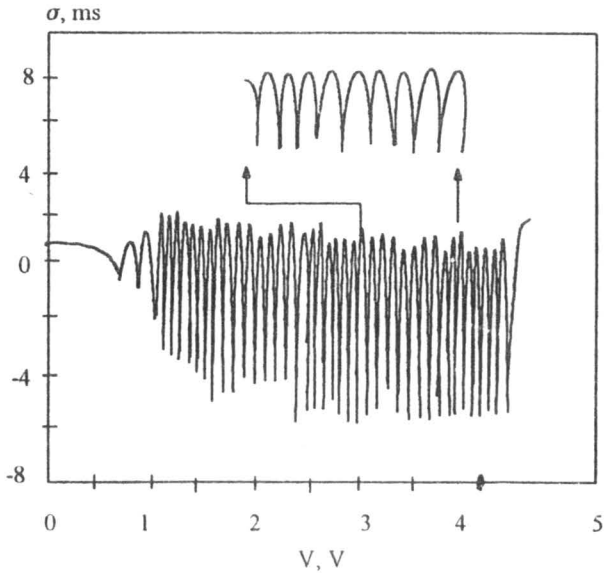


Fig. 5.13

către câmpul electric în spectrul de energie continuu de deasupra barierelor un timp τ, care reprezintă timpul de viaţă pe stările excitate.In acest timp electronii parcurg drumul liber mediu L și dau naștere unui curent fotoelectric. Drumul liber mediu este drumul după care electronii sunt recaptaţi în vaile cuantice. Pentru a înţelege funcţionarea fotodetectorilor cu un multiplu de văi cuantice este necesar să discutăm iniţial formarea domeniilor de câmp intens care are loc în aceste structuri la aplicarea câmpului electric. Considerăm o structură care constă din 49 de perioade din văi din GaAs cu L_v=7,6 nm și bariere din $Al_{0,27}Ga_{0,73}As$ cu L_b=8,8 nm. Pentru a reduce posibilitatea apariţiei stărilor de interfaţă se dopează numai regiunile centrale din văile de potential pe o distanţă de 5,6 nm cu Si($N_D=3.10^{17}cm^{-3}$). Pentru a facilita injecţia de electroni se dopează straturile de contact, din GaAs, atât cel de dedesubt (gros de 1 μm) cât și cel de deasupra (gros de 0,5 μm) cu $N_D=10^{18}cm^{-3}$. Aria structurii este circulară si și are diametrul de 50 μm.Caracteristica I-V s-a măsurat cu un analizor de parametri de tip HP4145 pentru polarizare directă (semnul plus la capătul superior al probei). Conductanţa la T=20K este reprezentată în Fig.5.13. Se observă că există 48 de picuri negative cu intervalul de tensiune între două asemenea picuri egal cu 85 ±18 mV. Diagrama de benzi de energie a superreţelei în absenţa tensiunii de polarizare este reprezentată în Fig.5.14a. La tensiune aplicată (Fig.5.14b) nivelele de energie nu mai coincid de la o vale de potenţial la valea adiacentă și în principiu nu mai este posibil efectul tunel rezonant. Insă, datorită relaxării electronilor pe starea fundamentală prin împrăstierea pe

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

fononi acustici sau impurităţi este posibil efectul tunel rezonant si in acest caz cu condiţia ca $qV_p << \hbar / \tau_1$ unde V_p este căderea de tensiune pe o perioadă a superreţelei (între două văi cuantice adiacente) iar τ_1 este timpul de relaxare a electronilor pe starea fundamentală. Prin urmare, la tensiuni aplicate mici (Fig.5.14b) este posibil transportul electronilor prin tunelarea rezonantă pe starea fundamentală a fiecărei văi cuantice. Primul pic negativ în conductanţa diferenţială are loc la o tensiune totală aplicată pe structură V=0,35V ceea ce indică întreruperea tunelării rezonante la $qV_p=2\hbar / \tau_1$ [16]. Presupunând că la tensiuni mici căderea de tensiune pe structură este uniformă rezultă că V_p=V/50=7 meV care dă pentru τ_1 aproximativ valoarea de 10^{-13}s. La V<0,35 V este posibil efectul tunel rezonant. In aceste condiţii curentul total $I=I_t+I_e+I_r$ unde I_t este curentul tunel rezonant, I_e este curentul de emisie termoelectronică iar I_r este curentul tunel asistat de fononi (care este neglijabil). Curentul tunel rezonant este dat de expresia

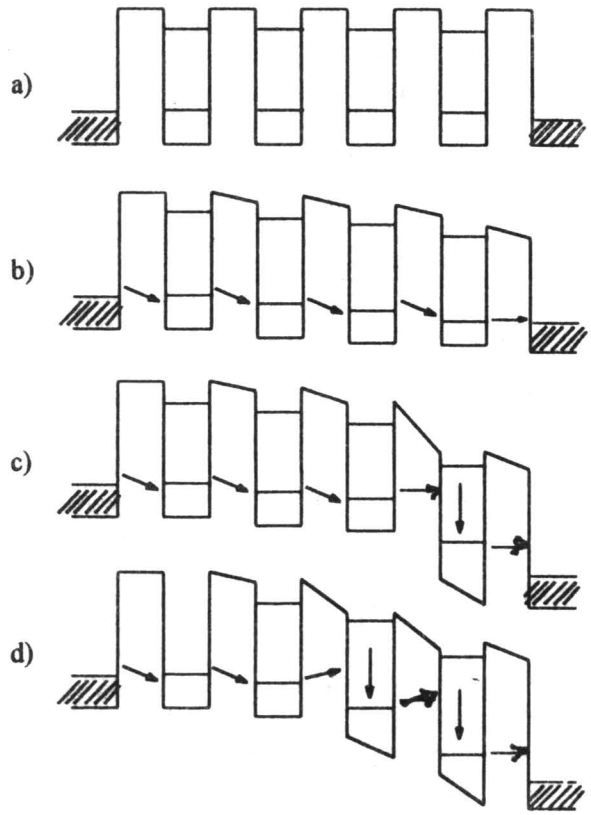


Fig. 5.14

$$I_t = \frac{qA}{\hbar L_v^2} T(V_p) kT \ln\left(\frac{1+e^{E_F/kt}}{1+e^{(E_F-qV_1)/kT}}\right) \qquad (3.1)$$

iar curentul de emisie termoelectronică este dat de expresia

$$I_e = \frac{q^2 m^*}{\pi\hbar^2} \frac{Av}{L_v} e^{-(U_b qV_2 - E_F - E_1)/kT} \qquad (3.2)$$

unde A este aria dispozitivului, V_1 este căderea de tensiune pe o barieră, E_F este nivelul Fermi, m^* este masa efectivă a electronului în GaAs,v este viteza de drift peste barieră, U_b este înălţimea barierei şi V_2 este căderea de tensiune pe o vale cuantică. Căderea de tensiune pe o perioadă a superreţelei este $V_p=V_1+V_2$. In aproximaţia WKB coeficientul de transmisie prin barieră este dat de expresia

$$T(Vp) = \exp\{-\frac{4L_b}{3q\hbar V_1}(2m_b)^{1/2}[(U_b - qV_2 - E_1)^{3/2} - (U_b - qV_p - E_1)^{3/2}]\}$$

unde m_b este masa efectivă a electronului în barieră. La tensiuni mari,când căderea de tensiune V_p pe o perioadă este mai mare decât $2\hbar / q\tau_1$, nu mai este posibil efectul tunel rezonant pe stările fundamentale şi apare o conductanţă diferenţială negativă. Creşterea numărului de picuri ale conductanţei cu creşterea tensiunii aplicate, arată că efectul tunel

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

rezonant se întrerupe succesiv de la o vale de potenţial la alta. Datorită efectului de ecranare, al sarcinii spaţiale,care creşte la tensiuni mari şi în consecinţă creşte înclinarea benzilor, procesul de întrerupere a efectului tunel rezonant într-o vale cuantică nu este aleatoriu, ci începe cu prima vale de lângă anod şi se deplasează de la o vale la alta succesiv către catod, cu creşterea tensiunii aplicate. Pentru un număr de n perioade ale superreţelei se obtin (n-1) picuri ale conductanţei diferenţiale negative. La o anumită tensiune aplicată se întrerupe curentul pe prima vale cuantică de lânga anod. Această întrerupere durează pâna când nivelul energetic E_2 din această vale coincide cu nivelul energetic E_1 din următoarea vale cuantică şi se restabileşte efectul tunel rezonant, aşa cum se reprezintă în Fig.5.14c. Pe prima perioadă de lângă catod, vale plus bariera din stânga ei, s-a stabilit un câmp intens, deoarece pe aceasta a cresut căderea de tensiune cu $(E_2-E_1)/q$. Insă datorită nedeterminării energiei electronului pe nivelul E_1 cu $2\hbar/\tau_1$ şi nedeterminării energiei pe nivelul E_2 cu $2\hbar/\tau_2$ unde τ_2 este timpul de viaţă a electronului pe acest nivel, perioada ΔV a oscilaţiilor conductanţei negative nu este $(E_2-E_1)/q$, ci

$$q\Delta V = (E_2 - E_1 \pm \frac{2\hbar}{\tau_1} \pm \frac{2\hbar}{\tau_2}) = 85 \pm 18\text{meV} \qquad (3.3)$$

După restabilirea curentului tunel prin prima perioadă a superreţelei (cea de lângă catod), cu creşterea în continuare a tensiunii aplicate,se întrerupe curentul rezonant in cea de a doua vale cuantică (numărată de la dreapta la stânga pe Fig.5.14) şi caracteristica I-V se repetă (Fig.5.14d). Curentul fotoelectric în structura apare numai în condiţiile de câmp intens aşa cum se reprezintă în Fig.5.12 deoarece numai în aceste condiţii electronii pot tunela uşor prin bariera de potenţial, care devine subţire. Mai mult, numai în câmp electric intens purtătorii pot fi transportaţi eficient de-a lungul superreţelei (viteza de deplasare creşte cu creeşterea câmpului electric). Curentul fotoelectric este dat de expresia (2.6) unde l este lungimea domeniului de câmp intens, v este viteza de transport de-a lungul superreţelei, iar n_f este numărul de purtători generaţi pe unitatea de volum din supereţea. Tensiunea fotoelectrica măsurată pe structură este dată de expresia

$$V_f = I_f \frac{R_s r}{R_s + r}$$

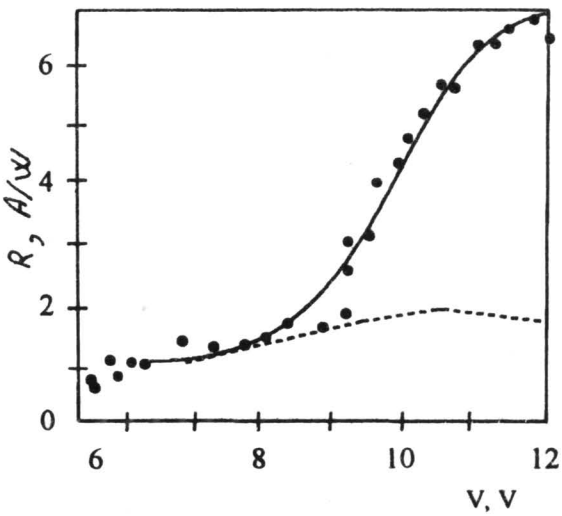


Fig. 5.15

unde r este rezistenţa probei iar R_s este rezistenţa de sarcină din circuit, ca şi în cazul unui fotoconductor convenţional. Această relatie a fost verificată experimental.Din dependenţa lui V_f^{-1} de R_s^{-1} s-a determinat r=200 Ω pentru structura considerată (din panta dreptei), care coincide cu valoarea rezistenţei determinată din panta caracteristicii I-V. Spectrul de absorbţie este de formă Lorentziană cu lărgimea liniei $h\Delta\nu = 2\hbar/\tau_2 = 11$ meV,de unde rezultă un timp de viată a electronului excitat pe nivelul E_2, $t_2=1,2.10^{-13}$s. Introducând acest rezultat în relaţia (3.3) şi având în vedere că $2\hbar/\tau_1 = 7$ meV, aşa cum s-a determinat mai sus, rezultă $E_2-E_1=102\pm1$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

meV. Lărgimea liniei de absorbtie este $2\hbar / \tau_2$ la polarizare zero. La tensiune de poalarizare diferită de zero lărgimea liniei responsivităţii în funcţie de hν este mai mare cu $2\hbar / \tau_t$, unde τ_t este timpul de tunelare. Pentru structura considerată contribuţia efectului tunel la lărgimea liniei este de 4,2 meV, astfel că lărgimea totală a liniei responsivităţii este 15,2 meV. Probabilitatea de ieşire a electronului din valea cuantică prin efect tunel este

$$p(\nu) = \frac{1}{1 + \frac{\tau_t(\nu)}{\tau_r}}$$

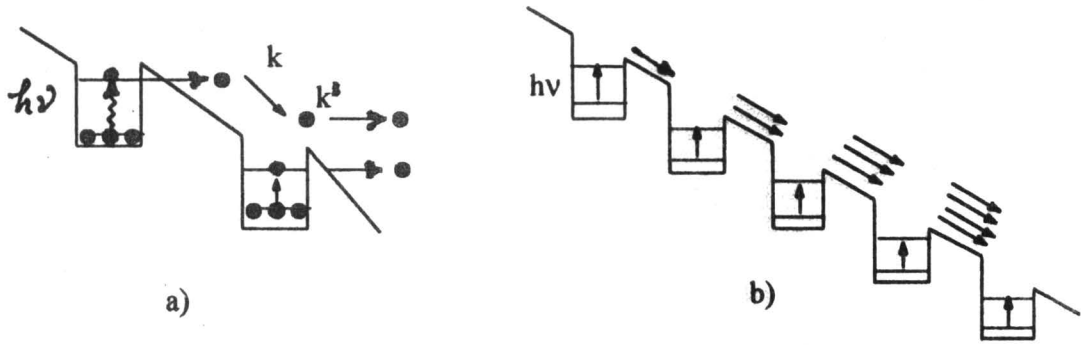


Fig. 5.16

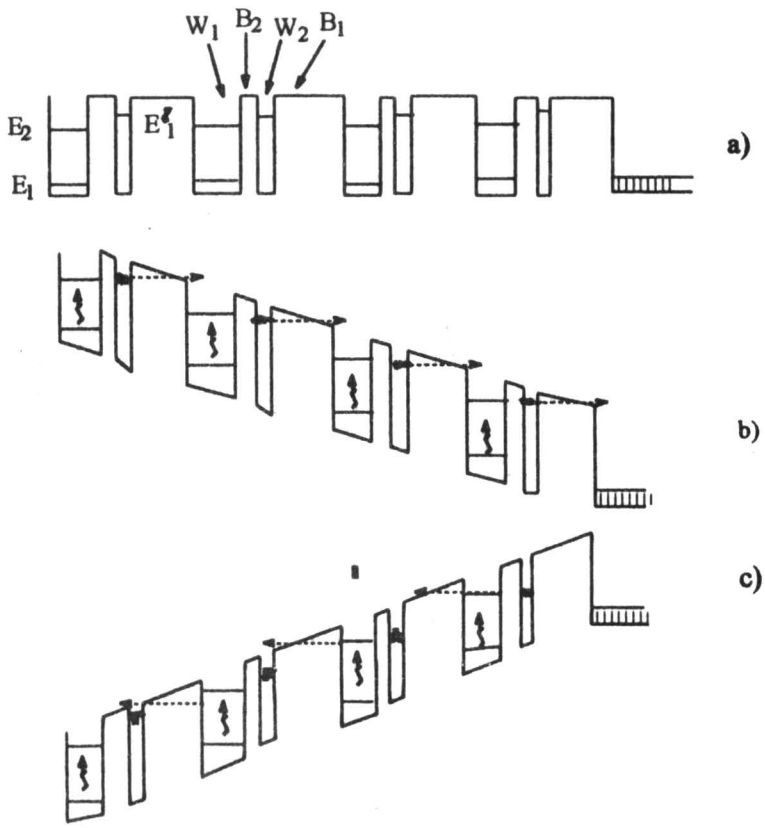


Fig. 5.17

unde τ este timpul de viaţă de recombinare a electronului excitat optic pe nivelul E_2. Pentru λ=10 μm, p=52%. In Fig.5.15 este reprezentată responsivitatea în funcţie de tensiunea de polarizare V, curba teoretică cu linie întreruptă, fără luarea în considerare a multiplicării în avalanşă, iar cu linie plină cu luarea în considerare a acesteia. Aşa cum arată punctele experimentale, peste valoarea de 9V a tensiunii de polarizare, apare multiplicarea în avalanşă şi responsivitatea creşte până la 7A/W. Procesul este reprezentat schematic în Fig.5.16. Un electron generat optic, de vector de undă **k** (orientat de-a

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

lungul axei x, de creştere a superreţelei) şi energie $E_k=\hbar^2k^2/2m_b$ (măsurată de la marginea inferioară a benzii de conducţie din barieră) este incident pe valea cuantică adiacentă care conţine electroni legaţi pe starea fundamentală E_1. Electronul incident cedează energie unui electron de pe E_1 (prin coliziune), care trece în starea E_2 si apoi tunelează.In urma coliziunii electronul incident a trecut în starea k′, $E_{k'}$. Procesul de multiplicare are loc în continuare (Fig.5.16b). In Fig.5.17 se reprezintă o superreţea în care o perioadă coţine două văi cuantice, una largă, W_1, cu grosimea de 7,2 nm (din GaAs dopat cu $n=10^{18}cm^{-3}$), una subţire W_2, cu grosimea de 1,8 nm (din GaAs nedopat) şi două bariere, una largă B_1 cu grosimea de 15,4 nm din $Al_{0,33}Ga_{0,67}As$ nedopat şi una subţire, B_2, cu grosimea de 3,9 nm fiind construită din acelaşi material. Structura conţine 50 de asemenea perioade cuprinse între două straturi

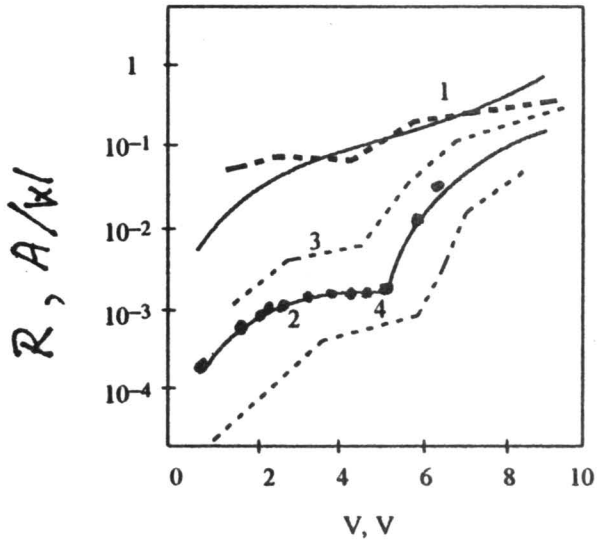


Fig. 5.18

de contact din GaAs ($n=10^{18}cm^{-3}$), cel de jos cu grosimea de 1μm iar cel de deasupra cu grosimea de 0,5 μm. In W_1 există două stări de energie, E_1=47 meV, E_2=183 meV iar în W_2 numai o stare E_1'=174 meV. Pentru electronii cu energia E_1 din W_1 transmisia prin cele două bariere este $T_1(E_1)T_2(E_1)$ unde T_1 şi T_2 sunt transmisiile prin barierele B_1 şi,respectiv, B_2. Procesul de conducţie este determinat de dependenţa de câmpul electric a lui T_1 deoarece acesta fiind foarte mic (B_1 este groasă faţă de B_2) în raport cu T_2, are rolul dominant. In prezenţa câmpului electric structura este divizată în domenii de câmp intens şi domenii de câmp slab. In ambele regiuni transportul electronului de pe nivelul E_1 se face prin efect tunel succesiv (secvenţial), similar cu cel reprezentat în Fig.5.14. Pentru electronii excitaţi optic, procesul de conducţie este diferit de acesta. La polarizare directă şi câmp intens este posibil ca electronul excitat optic de pe nivelul E_1 pe nivelul E_2 să tuneleze rezonant pe nivelul E_1' şi apoi să tuneleze prin bariera B_1 în banda de conducţie din regiunea din exteriorul barierelor deoarece $T_1(E_1')$ creşte cu creşterea câmpului electric aplicat. Intr-un anumit domeniu de tensiune aplicată pe structură, $T_1(E_1')\approx T_2(E_2)$ şi arte loc tunelarea rezonantă coerentă. Aşa se explică de ce responsivitatea într-o asemenea structură (Fig.5.18, curba 1) este cu mult mai mare decât responsivitatea într-o structură în care nu există tunelare coerentă (curba 3) [17]. La polarizare inversă (Fig.5.17c) $T_1(E_2)$ este totdeauna mai mic decât $T_2(E_1')$ şi în plus

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

nivelele E_1' și E_2 nu sunt aliniate astfel că rezonanţa coerentă este nesemnificativă. Responsivitatea în acest caz este reprezentată prin curba 3 din Fig.5.18. Totuşi şi în acest caz (la polarizare inversă) responsivitatea este mai nare decât în cazul structurilor care nu au perioada cu barieră dublă (curba 4). Deşi tunelarea electronilor excitaţi optic în structurile cu barieră dublă este coerentă, curentul de întuneric este transportat tot prin tunelare succesivă,ca şi în celelalte superreţele. Curentul de întuneric, prin tunelare succesivă, creşte de asemenea cu creşterea tensiunii aplicate. Datorită tunelării coerente a electronilor excitaţi optic, structurile cu perioada cu bariera dublă funcţionează la tensiuni aplicate mult mai mici pentru a obţine aceeaşi valoare a responsivităţii în comparaţie cu structurile cu perioada cu o singură barieră. In plus, curentul de întuneric la tensiuni mici (curentul de tunelare succesivă este cu două ordine de mărime mai mic decât curentul de întuneric la tensiuni mari, ceea ce măreşte responsivitatea acestora. Menţionăm că în structurile cu perioada cu o singură barieră (evident, şi o singură vale cuantică) pentru creşterea responsivităţii trebuie să se crească tensiunea de polareizare, ceea ce determină creşterea curentului de întuneric (de tunelare succesivă) şi deci reducerea responsivităţii. Prezentăm în continuare o structură a cărei diagramă de benzi de energie este reprezentată în Fig.5.19. Caracteristica acestei structuri este că văile cuantice sunt dopate alternativ (una dopată, una nedopată, etc.). Să considerăm o structură formată din 100 perioade, fiecare perioadă fiind compusă dintr-o vale cuantică din GaAs cu grosimea de 7 nm şi o barieră cu grosimea de 14,4 nm. Barierele sunt nedopate, văile cuantice cu număr impar sunt dopate cu $N_D=10^{18}cm^{-3}$ iar văile cuantice cu număr par sunt nedopate. onductanţa diferenţială a acestei structuri în funcţie de tensiunea aplicată este reprezentată în Fig.5.20 [18]. Se observă două grupuri de structuri de conductanţă diferenţială negativă. Primul grup, care constă din 50 de minime ale conductanţei,apare sub 3,2V şi se datorează întreruperii alinierii stărilor fundamentale din văile dopate şi nedopate din partea dreaptă din fig.5.19c iar al doilea grup de 50 de minime este datorat întreruperii alinierii nivelelor din partea stângă a structurii, Fig.5.19d. Responsivitatea măsurată la iradierea cu un laser cu CO_2 (λ=10,6 mm) fascicolul fiind incident pe o faţă tăiată la 45° (Fig.5.4), la 15K este reprezentată în Fig.5.21. Se observă că responsivitatea diferenţială prezintă o regiune negativă în raport cu tensiunea de polarizare, spre deosebire de cazurile analizate mai sus, unde avea o dependenţă (creştere) monotonă. La echilibru, fără tensiune aplicată, există totuşi o umplere parţială, a văilor nedopate, cu electroni astfel că nivelul Fermi în văile dopate este F_d=17,4 meV iar în văile nedopate F_n=4 meV. Aceasta determină o nealiniere de 13,4 meV între nivelele din văile dopate şi cele nedopate. La aplicarea unei tensiuni de polarizare nealinierea dintre nivelele din văile dopate şi cele nedopate din partea lor dreaptă creşte, pe când cea cu cle din partea stângă scade. Adică rata de umplere a văilor nedopate creşte în timp ce rata de golire scade, ceea ce conduce la o creştere a densităţii electronilor în văile nedopate.Totuşi, peste V=3,2V, unde întreaga superreţea are o structură de domenii alternantă (Fir.5.19c), creşterea tensiunii produce o descărcare rapida a văilor nedopate datorită creşterii alinierii nivelelor acestora cu nivelele din văile dopate din dreapta. Există, astfel, un maxim al densităţii electronilor în văile nedopate, la 3,4V. Acest maxim apare în responsivitate (Fig.5.21), deoarece numai în barierele din dreapta se formează domenii de câmp intens şi deci numai excitarea electronilor din văile nedopate contribuie la curentul fotoelectric. Probabilitatea de tunelare a electronilor din văile nedopate adiacente cu barierele de câmp intens este cu un ordin de mărime mai mare decât cea din văile dopate care sunt adiacente cu barierele de câmp slab. Acest transfer de sarcină dintre văile dopate şi nedopate, stă la baza modulatorilor optici.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

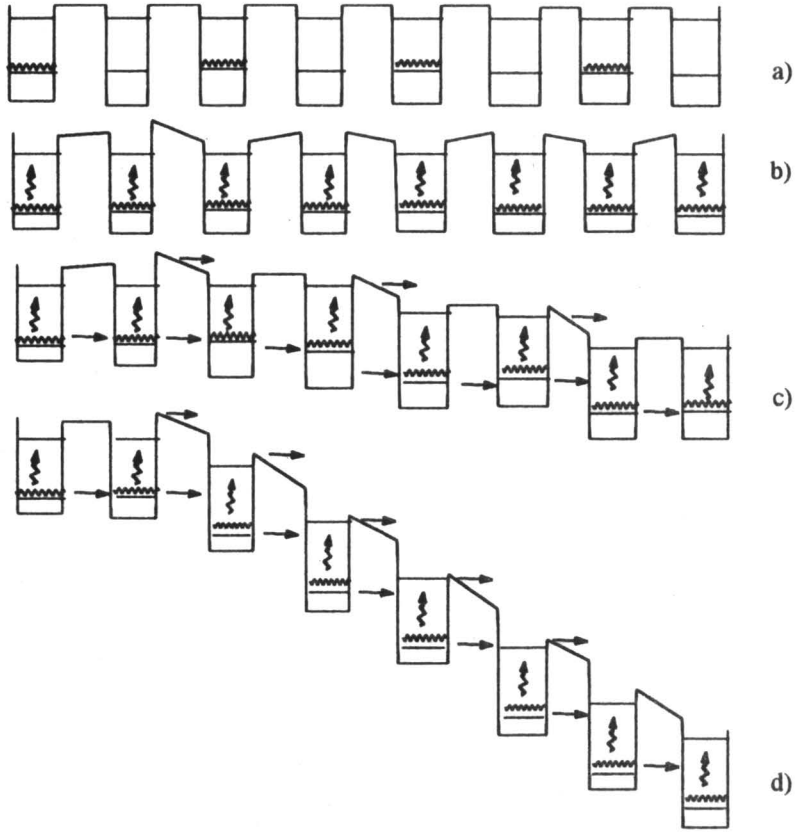


Fig. 5.19

5.4. *Detectori cu un multiplu de văi cuantice, cu excitare de pe stări legate în stări din spectrul continuu.*

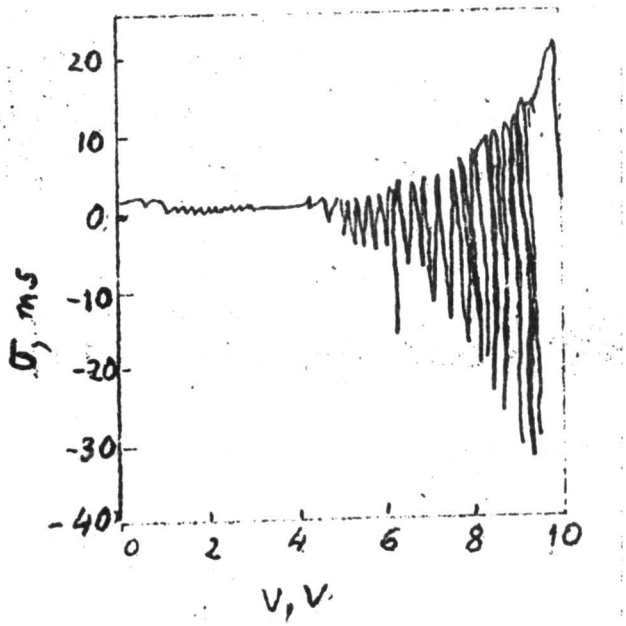


Fig. 5.20

In paragrafele precedente am studiat detectorii în care excitarea electronilor are loc de pe starea fundamentală, legată, pe o altă stare legată din valea cuantică, de pe care pot tunela si genera curentul fotoelectric. In cazul când valea cuantică contine două stări legate, absorbţia radiaţiei cu tranziţia de pe starea fundamentală în spectrul continuu de energie, situat deasupra barierelor, este foarte slabă [6]. Insă, cu subţierea văii cuantice, când lărgimea ei scade sub o anumită valoare, starea excitată legată trece în spectrul continuu, rămâne legată numai o

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

singură stare, starea fundamentală si atunci, evident că absorbţia radiaţiei de pe starea legata pe stări din spectrul continuu de energie, devine importantă. Avantajul acestei structuri este că electronul excitat nu mai trebuie să tuneleze printr-o barieră pentru a participa la transportul curentului electric (Fig.5.22).Valea cuantică este din GaAs si are grosimea L_v=4 nm iar bariera este din $Al_xGa_{1-x}As$ si are grosimea L_b=50 nm. In acest caz nu mai este nevoie de tensiune mare de poalrizare pentru ca electronul excitat să participe la curentul electric şi prin urmare, curentul de întuneric este mult mai mic In plus, grosimea barierelor poate fi mult mărită ceea ce conduce la micşorarea curentului de tunelare succesivă între starile fundamentale (curentul de întuneric) cu câteva ordine de mărime. Aceasta determină creşterea detectivităţii acestor structuri cu câteva ordine de mărime. In Tbela 4.1 sunt prezentate caracteristicile unui număr de 9 structuri : grosimea văii L_v, grosimea barierei L_b, fracţiunea de compoziţie x, concentraţia impurităţilor de dopare, tipul de conducţie, numărul de perioade, tranziţiile intersubbenzi, tranzitia stare legată-spectru continuu (L-C), tranziţia stare legată-stare legată (L-L), tranziţia stare legată-spectru cusaicontinuu (L-CC).

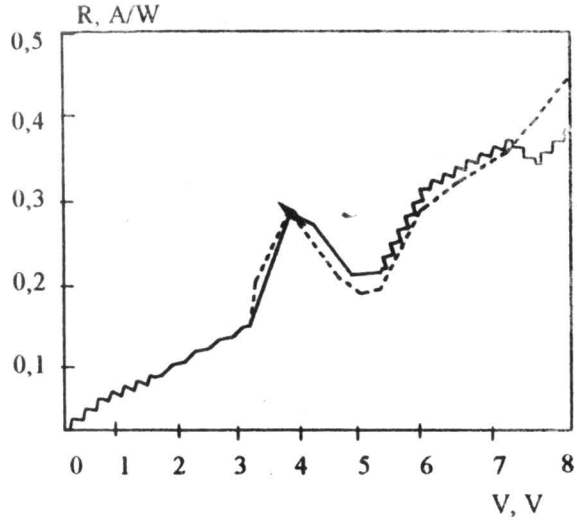


Fig. 5.21

Tabela 4.1

Structura	L_v,nm	L_b,nm	x	$N_{D,A}$, 10^{18},cm^{-3}	Tipul de conducţie	Număr perioade	Tranziţii intersubbenzi
A	4	50	0,26	1	n	50	L-C
B	4	50	0,25	1.6	n	50	L-C
C	6	50	0,15	0,5	n	50	L-C
D	7	50	0,10	0,3	n	50	L-C
E	5	50	0,26	0,42	n	25	L-L
F	5	5	0,30	0,42	n	25	L-CC
G	4	54	0,31	2	p	50	L-C
H	4	46	0,24	2	p	50	L-C
I	5	48	0,20	2	p	50	L-C

Primele şase structuri sunt de tip n (dopate cu Si) şi sunt preparate prin epitaxie cu fascicule moleculare, iar ultimele trei sunt de tip p şi sunt preparate prin depunere chimică din stare de vapori metal-organică. Structura este flancată de două straturi de contact din GaAs, cea de jos cu grosimea de 1 μm iar cea de deasupra cu grosimea de 0,5 μm. De la o structură la alta L_v variază de la 4 la 7 nm iar L_b rămâne practic constant, 50 nm.x variază între 0,10 şi 0,31, corespunzând unei lungimi de undă de prag λ=7,9-19 μm. Eşantioanele A-D sunt de tip n şi prezintă tranziţii L-C pe când proba E prezintă tranziţii L-L. Totuşi starea excitată în valea cuantică din această structură este foarte aproape de marginea barierei şi deci şi probabilitatea de tunelare este mare în comparaţie cu cazul structurilor prezentate în paragraful anterior.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

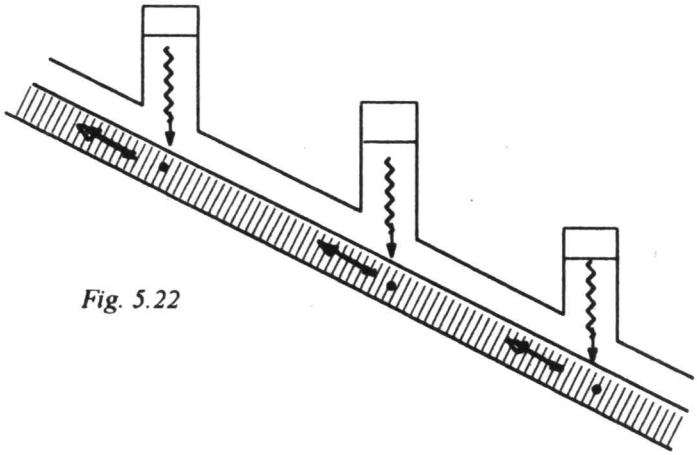


Fig. 5.22

Proba F a fost proiectată astfel încât starea excitată din valea cuantică să facă parte din spectrul de energie cuasicontinuu, adică este o stare intermediară între o stare strâns legată și una din spectrul continuu. In Fig.5.23 este reprezentat coeficientul de absorbţie în funcţie de lungimea de undă a radiaţiei pentru probele A-F la temperatura camerei cu excepţia probei D care funcţionează la lungimi de undă mai mari astfel ca la această temperatură absorbţia multifononică din substrat obturează tranziţiile intersubbenzi. Lungimea de undă a maximului de absorbţie depinde de compoziţia, x, de aluminiu și de lărgimea văii cuantice, așa cum se reprezintă în Fig.5.24. Din figură se observă că spectrele eșantioanelor A,B,C, care se datorează tranziţiilor de pe stări legate pe stările din continuu, sunt mult mai largi decât spectrele probelor E și F datorate tranziţiilor pe stari legate sau cuasicontinui. In primul caz $\Delta\lambda/\lambda$=33% iar în al doilea caz $\Delta\lambda/\lambda$=9–11%. $\Delta\lambda$ este lărgimea liniei spectrale pentru $\alpha=\alpha_{max}/2$, iar λ este lungimea de undă la maximul lui α. De asemenea, așa cum reiese din figură, coeficientul de absorbţie a pentru probele A,B,C este mai mic decât pentru probele E si F (pentru care este valabilă scala din dreapta figurii, așa cum indică săgeţile). Aceasta se datoreaza faptului ca absorbţia integrală se conservă

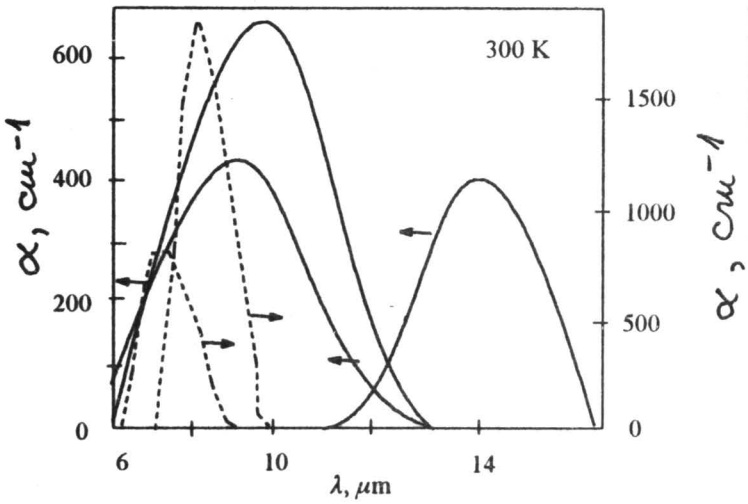


Fig. 5.23

$$\int_0^{\infty}\alpha(\nu)d\nu = \left(\frac{N_D L_\nu q^2 hf}{4\varepsilon_o m c m_r}\right)\frac{\sin^2\theta}{\cos\theta}$$

unde f este tăria oscilatorului,adică $\alpha_{max}(\Delta\lambda/\lambda)N_D$ este o mărime aproximativ constantă.Valoarea absolută a responsivităţii s-a determinat cu mare exactitate prin măsurarea fotocurentului I_f utilizând o sursă corp negru calibrată și o apertură mică, de ~2 mm în faţa vasului Dewar în care este introdusă proba, pentru a reduce orice reflexii din exterior ale sursei de infraroșu. Fotocurentul este dat de relaţia

$$I_f = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} R(\lambda)P(\lambda)d\lambda \qquad (4.1)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde λ_1 și λ_2 sunt limitele de integrare ale spectrului responsivității și $P(\lambda)$ este puterea corpului negru pe unitatea de lungime de undă, incidentă pe detector, care este dată de expresia [19]

$$P(\lambda) = W(\lambda)\sin^2(\Omega/2)AC_F\cos\theta \quad (4.2)$$

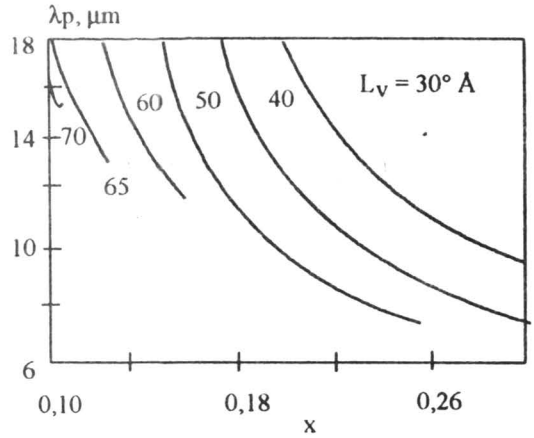


Fig. 5.24

A este aria detectorului, Ω este unghiul sub care detectorul "vede" sursa (adică pentru un orificiu circular, de rază a, situat la distanța D de detector, $\tan(\Omega/2) = a/D$, astfel că $\sin^2(\Omega/2)=[4f_n^2+1]^{-1}$ unde f_n este numărul f al sistemului optic, q este unghiul de incidență iar factorii de cup[laj sunt grupați în $C_F=T(1-r)M$ unde T este transmisia filtrelor și ferestrelor, r=28% este reflectivitatea suprafeței detectorului din GaAs și M este factorul de modulare al fascicolului optic (pentru un modulator de fascicul optic, ideal M=0,5). In ec. (4.2) $W(\lambda)$ este densitatea spectrală a corpului negru

$$W(\lambda) = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5}(e^{hc/\lambda kT} - 1)^{-1} \quad (4.3)$$

adică este puterea radiată pe intervalul unitate de lungime de undă, pe unitatea de arie a corpului negru situat la temperatura T. Combinând ec.(4.1) și (4.2), scriind $R(\lambda)=R_pR_n(\lambda)$ unde R_p este responsivitatea maximă iar R_n este responsivitatea spectrală normată (la unitate la λ_p) și grupând toți factorii de cuplaj în $G=\sin^2(\Omega/2)AC_F\cos\theta$ se poate scrie

$$I_p=R_pG\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} R_n(\lambda)W(\lambda)d\lambda \quad (4.4)$$

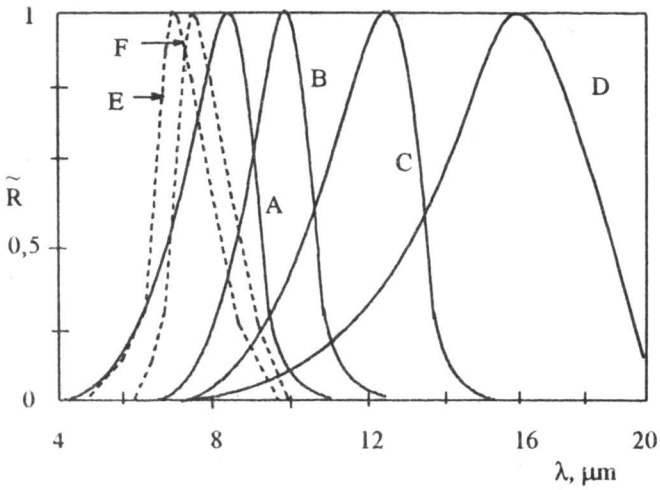


Fig. 5.25

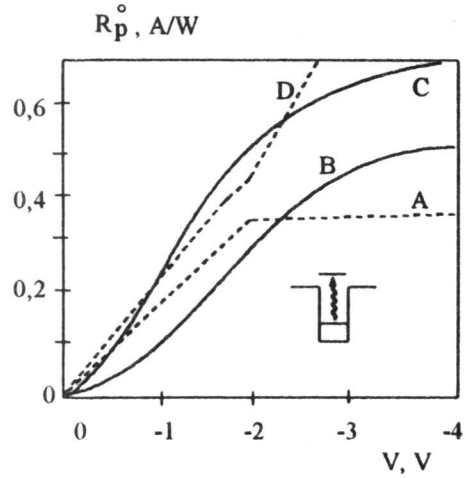


Fig. 5.26

Măsurând fotocurentul la T=1000K se poate determina cu exactitate R_p. Responsivitatea normată, $R_n(\lambda)$ este reprezentată în Fig.5.25 pentru probele A-F.Suprafața detectorului are diametrul de 200 μm.Se observă că pentru stările excitate legate si din cuasicontinuu (probele

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

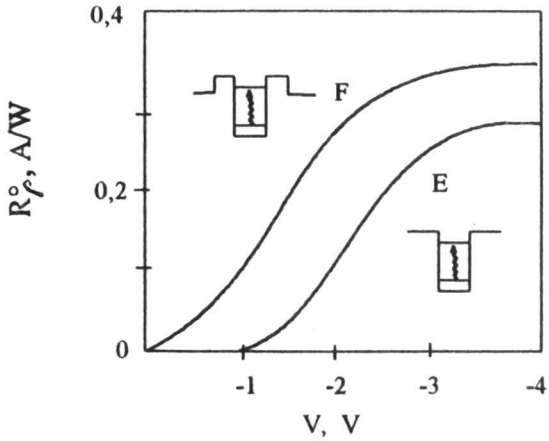


Fig. 2.27

E și F) lărgimea liniei $\Delta\lambda/\lambda$=10-11% este mai mică decât pentru stările excitate din continuu (probele A-D), $\Delta\lambda/\lambda$=19-28%.Dependența responsivității R_p de tensiunea de polarizare este reprezentată în Fig.5.26 pentru probele A-D și în Fig.5.27 pentru probele E și F. Semnul minus la tensiune arată că la contactul de deasupra structurii se află semnul minus al sursei de tensiune electrică (la partea neiluminată, deoarece proba este iluminată prin spate, așa cum se reprezintă în Fig.5.4). Pe Fig.5.27 se observă că pentru proba E, unde are loc excitarea pe o stare legată, responsivitatea nu începe de la valoarea zero a tensiunii ci dela tensiunea de 1 V necesară pentru apariția unui curent tunel semnificativ. Se observă ca responsivitatea crește în toate cazurile cu cresterea tensiunii de polarizare și la o anumită tensiune, în jur de 3-4 V atinge o valoare de saturație. Amplificarea fotoconductorului, g=L/l, unde este drumul liber mediu al electronilor, până când sunt recaptați pe nivelul fundamental, și l este lungimea superrețelei (pentru proba B,l=2,7 mm), crește cu tensiunea aplicată și atinge o valoare de saturație la o anumită valoare a tensiunii aplicate. Detectivitatea la valoarea maximă a responsivității este

$$D^* = \frac{R_p\sqrt{A\Delta f}}{i_z}$$

unde A este aria detectorului, Δf este banda de frecvență,care se ia egală cu 1 Hz, și i_z este curentul de zgomot. Curentul de zgomot de întuneric este dat de expresia

$$i_z = \sqrt{4qI_i g\Delta f}$$

unde I_i = nqvA este curentul de întuneric. Utilizând pentru R_p expresia

$$R_p = \frac{q}{h\nu}\eta_a p_e g$$

se obține pentru detectivitatea limitată de catre zgomotul de întuneric, expresia

$$D^* = \frac{\eta_a p_e}{2h\nu}\left(\frac{\tau}{nl}\right)^{1/2} \qquad (4.5)$$

unde s-a utilizat, de asemenea, expresia $g=v\tau/l.n$ reprezintă numărul de electroni excitați termic din valea cuantică peste barieră,

$$n(V) = \frac{m}{\pi h^2 L_p}\int_{E_1}^{\infty} f(E)T(E,V)dE; \qquad f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_1-EF)/kT}+1}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

T(E,V) este transmisia printr-o singură barieră ,și este dependentă de tensiunea V. Dacă se consideră T(E)=0 pentru $E<U_b$ (înălțimea barierei) și T(E)=1 pentru $E>U_b$, pentru $E>U_b$ rezultă

$$n = \frac{m^* kT}{\pi\hbar^2 L_p} e^{-(E_c - F)/kT} \tag{4.6}$$

unde $E_c=U_b-E_1$ iar $L_p=L_v+L_b$ este perioada superrețelei. Pentru a calcula detectivitatea limitată de către zgomotul de fond se substituie în relația (4.5) concentrația n a electronilor excitați termic,cu concentrația electronilor generați de către intensitatea radiației de fond $I_f=P_f/A$, astfel că

$$n = \frac{I_f \eta_a p_e \tau}{h\nu l}$$

Se obține

$$D_f^* = \frac{1}{2}\left(\frac{\eta_a p_e}{h\nu I_f}\right)^{1/2}$$

Pentru I_B=2 mW/cm^2 (corespunzând unui flux de fotoni $\Phi=10^{17}$fotoni/cm^2.s), η_a=20%, p_e=50%, λ_p=10 μm se obține $D_f=2{,}5.10^{10}$ cmHz$^{1/2}$/W. Se mai defineste diferența de temperatură echivalentă de zgomot ΔT_z (în literatura străină, NEΔT) prin relația

$$\Delta T_z = \frac{(A\Delta f)^{1/2}}{D_n^*(dP_f / dT)} \tag{4.7}$$

unde dP_f/dT este variația cu temperatura a puterii incidente pe detector, provenită de la corpul negru. Pentru C_F=1

$$P_n = A\sin^2\left(\frac{\Omega}{2}\right)\cos\theta\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} W(\lambda)d\lambda$$

și se poate considera cu bună aproximație

$$\frac{dP_n}{dT} = \left(\frac{P_n}{T_n}\right)\frac{h\nu}{kT_n} \tag{4.8}$$

T_n este temperatura corpului negru. Detectivitatea corpului negru D_n^* se scrie

$$D_n^* = \frac{R_o\sqrt{A\Delta f}}{i_n} \tag{4.9}$$

unde R_o este responsivitatea corpului negru (valoare medie)

$$R_o = \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} R(\lambda)W(\lambda)d\lambda}{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} W(\lambda)d\lambda} \tag{4.10}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Pentru un detector cu excitare de pe stare legată pe stări din continuu,cu maximul la $\lambda_p=10$ μm, şi $\lambda_1=8\mu m$, $\lambda_2=12\mu m$ $\Delta\lambda/\lambda=30\%$, $T_n=300K$ se obţine din (4.8) că $R_o=0,7R_p$. Utilizând ecuaţiile (4.4), (4.7)-(4.10) se poate scrie

$$\Delta T_z = \frac{i_n}{I_f}\frac{kT_n}{h\nu}T_n \qquad (4.11)$$

de unde rezulta că diferenţa de temperatură de zgomot este proporţională cu raportul dintre curentul de zgomot şi curentul fotoelectric.Pentru $D_n^*=10^{10}cmHz^{1/2}/W,\lambda=10$ μm, $\Delta f=60$ Hz,se obţine $\Delta T_z=10$ mK.Acesta este zgomotul datorat fluctuaţiilor temporare ale parametrilor caracteristici; de exemplu,temperatura corpului negru are fluctuaţia în timp, Δt_z. Există, de asemenea, un zgomot spaţial, datorat neuniformităţilor spaţiale ale reţelelor de imagine,pe care-l vom discuta în finalul acestui capitol. Detectivitatea (4.5) depinde de concentraţia N_D de dopare a văilor cuantice. Se poate scrie

$$D^* \sim \frac{\rho}{\sqrt{e^{\rho}-1}}$$

unde $\rho=N_D/n_o$.La T=77K, $n_o=4,6.10^{17}cm^{-3}$, detectivitatea are valoarea maximă la r=1,6, ceea ce corespunde lui $N_D=7,4.10^{17}cm^{-3}$. Am observat,de asemenea ,mai sus,că responsivitatea si deci detectivitatea creşte cu creşterea grosimii barierei, datorita scăderii lui I_i (curentului de întuneric). Această creştere atinge o saturatie la $L_b=50$ nm. Peste această valoare detectivitatea nu mai creşte deoarece reducerea tunelării prin bariere mai groase este parţial compensată de necesitatea utilizării unor tensiuni de polarizare mai mari.

5.5. *Detectori cu văi cuantice şi bariere asimetrice.*

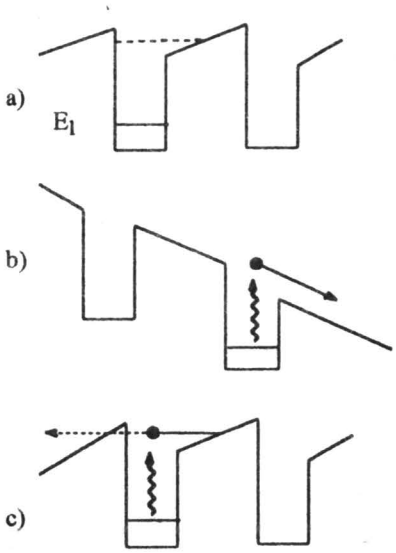


Fig. 5.28

Am văzut ca detectivitatea, ca şi responsivitatea, creşte cu creşterea amplificării g a fotoconductorului şi deci cu timpul de viaţă, τ, al electronului pe starea excitată. Captura electronului de pe starea excitată pe starea fundamentală este dominată de împrăştierea pe fononi optici longitudinali. In absenţa unei tensiuni de polarizare τ este de ordinul picosecundelor.Prin emisia unui singur fonon LO electronul cade înapoi pe nivelul fundamental şi are o probabilitate mică de a ieşi din valea cuantică. Prin aplicarea unei tensiuni de polarizare ,probabilitatea de captură a electronului este redusă şi timpul de viaţă creşte la 30-40 ps [20]. Creşterea timpului de viaţă se datorează în mare parte excesului de energie a electronului deasupra văii cuantice. Importanţa excesului de energie a electronului faţă de energia fononului LO se pune clar în evidenţă în văile cuantice asimetrice cu bariere gradate [21]. In fig.5.28 se reprezintă o structură cu văi cuantice din GaAs cu $L_v=6$ nm si cu bariera din $Al_xGa_{1-x}As$ cu $L_b=36$ nm în care compoziţia x variază de la 22% la 27%, ceea ce

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

corespunde unei diferenţe de energie de la un capăt al barierei la celălalt, egală cu 42 meV. Această diferenţă de energie dă nastere unui câmp intern. Aşa cum se reprezintă în Fig.5.28a la polarizare zero starea excitată este legată (linia întreruptă) si absorbţia intersubbenzi determină o tranziţie între stări legate. La polarizare directă (polul pozitiv la electrodul superior), Fig.5.28b, starea excitată se afla în spectrul continuu şi spectrul de absorbţie se lărgeşte. La polarizare inversă starea excitată este legată si electronul excitat iese în afara văii cuantice prin tunelare prin barieră (Fig.5.28c). In Fig.5.29 se reprezinta spectrul responsivităţii la polarizare directă, V=+0,6V, pentru diverse probe. Curba 1 este pentru proba cu bariere rectangulare simetrice, curba 2 este pentru proba cu bariere asimetrice în care x variază de la 22,5 la 25% şi ΔU_b=25 meV iar curba 3 este pentru proba cu bariere asimetrice în care x variază de la 22% la 27% şi ΔU_b=42 meV. Se observă că cu creşterea asimetriei maximul spectral se deplasează spre lungimi de undă mai mici. Aceasta se datorează faptului că efectul Stark creşte cu creşterea asimetriei barierei. Pentru văi cuantice rectangulare simetrice deplasarea în câmp electric a spectrului de absorbţie intersubbenzi este mică ,deoarece termenul liniar in câmp electric este interzis de către condiţiile de simetrie; este permisă numai deplasarea în termenul pătratic în câmpul electric. Asimetria văilor sau barierelor permite creşterea efectului, deplasării liniare cu câmpul electric. La polarizare inversă are loc deplasarea maximului de absorbţie în sens invers,adică spre lungimi de undă mai lungi şi spectrul se ingustează. Cu toate acestea, lungimea de undă de prag la polarizare directă este mai mare decât la polarizare inversă deoarece în primul caz energia minimă de excitare si de generare a curentului fotoelectric este mai mică (Fig.5.28). In Fig.5.30 este reprezentată o structură cu vai cuantice gradate mai complexă [22]. Ea conţine 50 perioade, fiecare constând dintr-o vale asimetrică şi o barieră simetrică (Fig.5.30a). Valea asimetrică are o secţiune cu lărgimea de 4 nm din GaAs dopat cu $N_D=10^{18}cm^{-3}$şi o secţiune din $Al_xGa_{1-x}As$ nedopat, gradată liniar de la x=0,28 la x=0,15 cu grosimea de 100 nm. Bariera are grosimea de 50 nm şi este construită din $Al_{0,35}Ga_{0,65}As$. Structura este mărginită de o parte si de alta de straturi de GaAs dopate cu

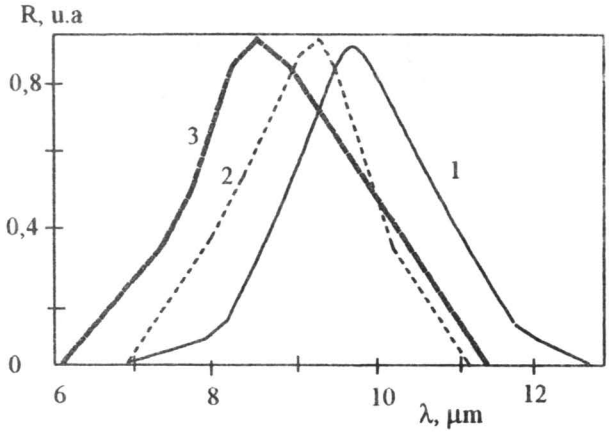


Fig. 5.29

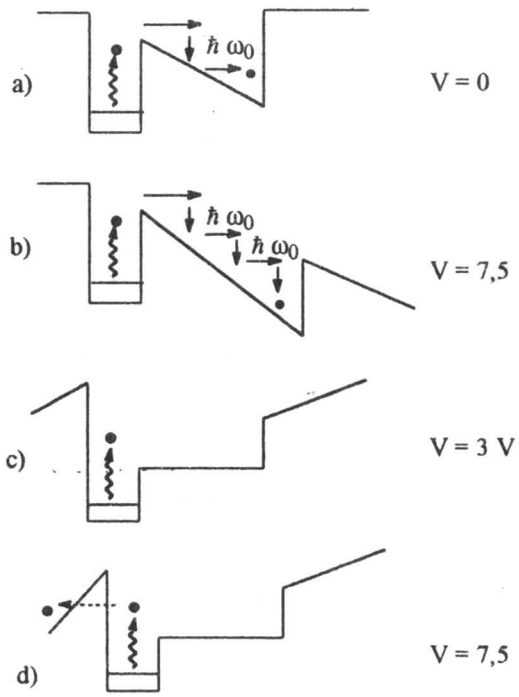


Fig. 5.30

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$N_D=10^{18}cm^{-3}$, cel superior cu grosimea de 0,5 μm şi cel inferior cu grosimea de 1μm. Secţiunea de 4 nm din valea cuantică conţine numai o singură stare legată, iar starea excitată se află cu câţiva meV deasupra colţului x=0,28 şi cu ~ 50 meV sub marginea superioară a barierei $Al_{0,35}Ga_{0,65}As$. Prin urmare, starea excitată este o stare cuasicontinuă în raport cu secţiunea de 4 nm din valea cuantică şi este o stare legată în raport cu bariera înaltă din $Al_{0,35}Ga_{0,65}As$. Un electron excitat optic pe această stare, în afara secţiunii de 4 nm a văii, va fi deplasat de catre câmpul din secţiunea gradată a văii unde poate relaxa prin emisie de fononi pe lărgimea de 100 nm a acesteia şi rămâne stocat un timp τ_s. El poate reveni înapoi pe starea fundamentală din secţiune de 4 nm a văii prin emisie termoelectrică, prin efect tunel, prin relaxare dielectrică sau prin transportul prin circuitul exterior. Transferul electronului din secţiunea văii de 4 nm şi stocarea sa in secţiunea gradată a văii, generează o polarizare

$$\Pi=n_s q\Lambda p_e \tag{5.1}$$

unde n_s este numărul de electroni excitaţi şi stocati pe cm^3, Λ=100 nm iar p_e este probabilitatea de transfer. Se poate scrie

$$n_s = \frac{\alpha P}{Ah\nu}\cos\theta$$

unde P este puterea radiaţiei şi q este unghiul de incidenţă. Tensiunea fotoelectrică generată la iluminare în infraroşu este corelată cu polarizarea indusă prin expresia $\Pi=qV_e/l$ unde l=3,08 μm este grosimea totală a celor 20 perioade. Responsivitatea de tensiune $R_V=V_e/P$ este

$$R_V = \frac{q}{h\nu}\frac{\alpha\Lambda p_e\tau_s}{C}\cos\theta \tag{5.2}$$

unde $C=\varepsilon A/l$ este capacitatea dispozitivului. Prin urmare, această structură functionează ca detector fotovoltaic. Trebuie menţionat că, din păcate, există şi un răspuns fotovoltaic datorită contactelor ohmice. Din ec.(5.2) rezultă că responsivitatea este proporţională cu timpul de stocare a sarcinii transferată optic. Pentru valori uzuale ale rezistorului de sarcină, r< 10 MΩ, timpul de relaxare este dominat de către circuitul extern, adică τ_s=RC. Substituind această valoare în ec.(5.2) rezultă

$$R_V = \frac{q}{h\nu}\alpha\Lambda p_e r\cos\theta \tag{5.3}$$

Responsivitatea de curent, dacă se măsoară curentul se scrie

$$R_A = \frac{q}{h\nu}\alpha\Lambda p_e\cos\theta \tag{5.4}$$

Notăm că $\eta_a=\alpha l$ şi $g=\Lambda/l$. Spectrul responsivităţii R_V la polarizare zero este reprezentat în Fig.5.31. R_V are valoarea maximă, 30V/W, la λ_p=6,8 μm. La polarizare inversă, R_V creşte (Fig.5.32) datorită creşterii probabilităţii p_e de transfer al sarcinii şi la V=-7,5 V atinge valoarea de 1200V/W. La polarizare directă responsivitatea scade cu creşterea tensiunii, atinge valoarea zero la V=3V ca apoi să crească si să atingă valoarea R_V=1000V/W la V=+7,5V (Fig.5.32). Aceasta se datorează creşterii transparenţei tunel a

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

electronilor excitati optic (Fig.5.30d). Dacă se introduc aceste valori ale responsivităţii în relaţia (5.3) se determină probabilitatea de transfer p_e. La V=-7,5V, p_e=90%. La polarizare zero, p_e=2%, adică este mică deoarece electronii excitaţi rămân încă puternic localizaţi în secţiunea de 4 nm a văii cuantice. Un alt tip de vale cuantică puternic asimetrică este valea cuantică în treaptă, prezentată în cap.III.

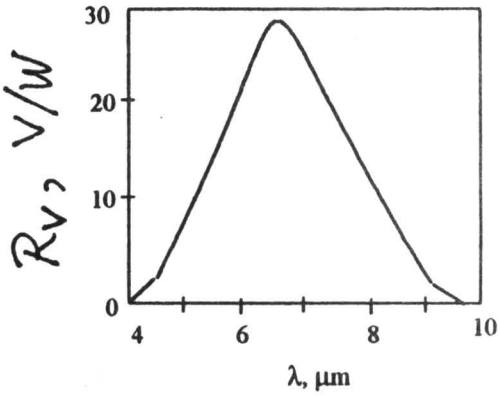


Fig. 5.31

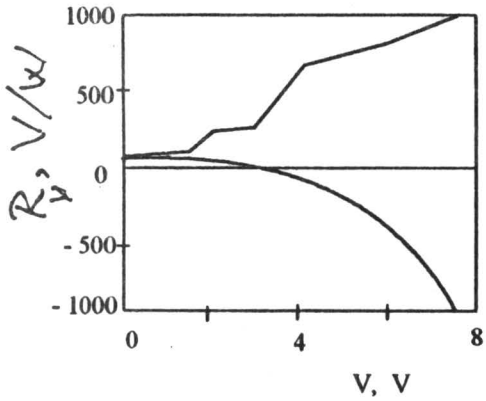


Fig. 5.32

5.6. *Detectori cu superreţele cu structură de minibenzi de energie.*

Am văzut în paragrafele precedente că pentru a micşora curentul de întuneric,prin tunelare succesivă pe stările fundamentale, în detectorii cu superreţele trebuie sa mărim grosimea barierelor de potenţial dintre văile cuantice. Astfel, văile cuantice devin practic independente, necuplate. In acest paragraf vom discuta situatia inversă, când barierele dintre văile cuantice sunt subţiri şi văile cuantice sunt puternic cuplate între ele. In această situaţie unui nivel din valea cuantică singulară îi corespunde în superreţea o minibandă. Cea mai simplă structură de acest fel este o superreţea ideală infinită care constă din văi cuantice care conţin un singur nivel de energie în stare izolată, cuplate prin bariere subţiri. Aceasta conţine o singură minibandă de energie a electronilor situată sub bariere şi o serie de minibenzi de stări excitate,situate deasupra barierelor (Fig.5.33a). Pe figură este reprezentată numai prima bandă a stărilor excitate, deoarece aceasta intervine în procesele de conducţie studiate. Prin absorbţia

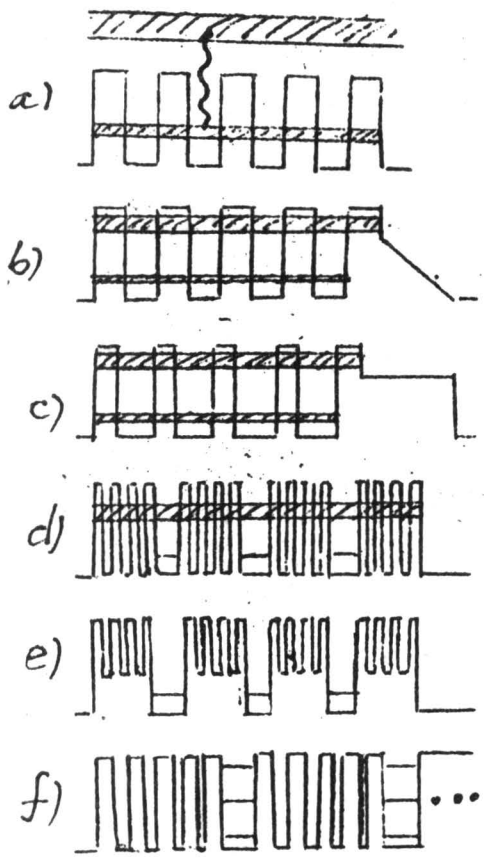


Fig. 5.33

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

radiației electronul este transferat din minibanda fundamentală în minibanda excitată. O superreţea care conţine văi cuantice cu L_v=4 nm din GaAs (dopat cu $N_D=10^{18}cm^{-3}$) și bariere din $Al_{0,38}Ga_{0,72}As$ cu L_b=3 nm are lărgimea minibenzii fundamentale ΔE_1=41 meV,iar a primei minibenzi de stări excitate ΔE_2=210 meV. Superreţeaua conţine 100 perioade ,mărginite de o parte și de alta de straturi de GaAs pentru contactele electrice.

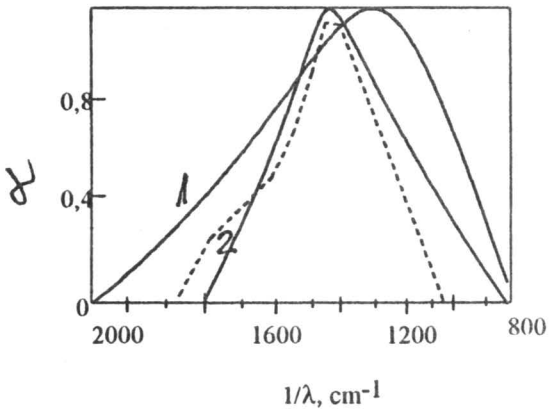


Fig. 5.34

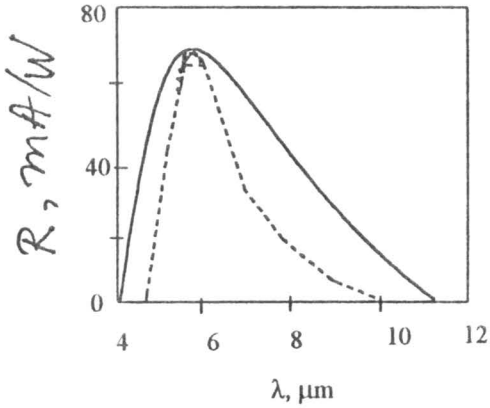


Fig. 5.35

Dacă în superreţeaua respectivă se creşte grosimea barierelor la L_b=4,5 nm atunci se obţine ΔE_1=17 meV și ΔE_2=128 meV. Spectrul coeficientului de absorbţie α este reprezentat în Fig.5.34, curba 1 pentru superreţeaua cu L_b=3 nm și curba 2 pentru cea cu L_b=4,5 nm. Se observă ca lungimea de undă λ_p~9 μm, corespunzătoare maximului, este relativ independentă de grosimea barierei și depinde în principal de lărgimea văii cuantice.O vale cuantică izolată,cu pereţi de înălţime infinită, are maximul coeficientului de absorbţie în jurul aceleiași valori. Valorile absolute ale maximului coeficientului de absorbţie sunt α=3100 și 1800 cm^{-1} pentru proba 1 și respectiv, 2. De asemenea, proba 1 are spectrul de absorbtie mai larg și lungimea de undă de prag mai mare. Responsivitatea, calculată din teoria minibenzilor,este dată de relaţia

$$R = \frac{q}{h\nu}\eta_a v_g \frac{\tau}{l}$$

unde $v_g=(1/\hbar)(\partial E/\partial k)$ este viteza de grup din minibandă și τ este timpul de viaţă a purtătorilor excitaţi. Valorile calcultae teoretic ale lui v_g sunt $1,5.10^7$ și 8.10^6 cm/s pentru proba 1 si respectiv, 2. Responsivitatea pentru cele două probe este reprezentată în fig.5.35 și, respectiv, 5.36:cu linie plină rezultatele experimentale si cu linie întreruptă rezultatele teoretice conform cu relaţia de mai sus. Din compararea rezultatelor teoretice cu cele experimentale se găseşte τ=5 ps. Se observă că poziţiile maximelor spectrale ale responsivităţii (Fig.5.35, 5.36) nu coincid cu poziţia maximului coeficientului de absorbţie (Fig.5.34). Aceasta se datorează faptului că viteza de grup are maximul în apropierea mijlocului benzii permise și se anulează la margini pe când coeficientul de absorbţie are maxim la marginea inferioară a benzii. Dezavantajul supereţelelor cu o singură minibandă de stări legate este că ele prezintă un curent mare de întuneric prin efect tunel în această minibandă. Pentru micșorarea curentului de întuneric s-au propus diverse variante de structuri, care sunt prezentate în Fig.5.33b-f. Structurile din Fig.5.33 b și c conţin două minibenzi legate, astfel că tranziţia optică are loc între minibenzi legate. Stratul de colector

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

este proiectat astfel ca să fie larg în partea de jos încât să blocheze curentul tunel pe satrea fundamentală, şi subţire în partea de sus astfel ca fotoelectronii (electronii din banda de sus proveniţi din banda de jos prin excitare optică) sa poată tunela uşor. In Fig.b bariera colector este gradată iar în Fig.c este treaptă. Structurile d şi e prezintă tranziţii între o stare legată şi o minibandă legată, ceea ce de asemenea conduce la micşorarea curentului de întuneric faţă de structura a.In Fig.5.34f se reprezintă o superreţea asimetrică,variabilă spaţial. Datorită asimetriei barierelor, este posibilă tranziţia optică între nivelele E_1 si E_2, care în general este interzisă. Aceasta permite o absorbţie la lungimi de undă scurte,cu maximul lui α la 5μm.

5.7. Detectori de radiaţie cu superreţele de tip p.

In superreţelele de tip n, studiate în paragrafele anterioare, regulile de selecţie ale mecanicii cuantice în banda de conducţie cu simetrie Γ interzic absorbţia radiaţiei la incidenţă normală. De aceea se utilizează incidenţa la 45° sau reţelele optice, aşa cum vom prezenta într-unul din paragrafele ulterioare. In probele dopate de tip p, deoarece la $k\neq0$ există o mixare între golurile uşoare şi grele, din banda de valenţă, este permisă absorbţia la incidenţă normală. Pentru o superreţea în care are loc tranziţia de pe o stare legată în stări din spectrul continuu responsivitatea este reprezentată în fig.5.37. Aşa după cum se observă pe figură, responsivitatea la incidenţă normală (curba 1) este mai mare decât cea la incidenţă la 45° (curba 2). S-a utilizat o superreţea care conţine 50 de perioade cu văi cuantice cu L_v=3 nm (dopate cu Be, $p=4.10^{18}cm^{-3}$) separate de bariere din $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ cu L_b=30 nm. Straturile de contact electric, de o parte şi de alta a structurii, sunt din GaAs cu $p=4.10^{18}cm^{-3}$. Iluminarea se

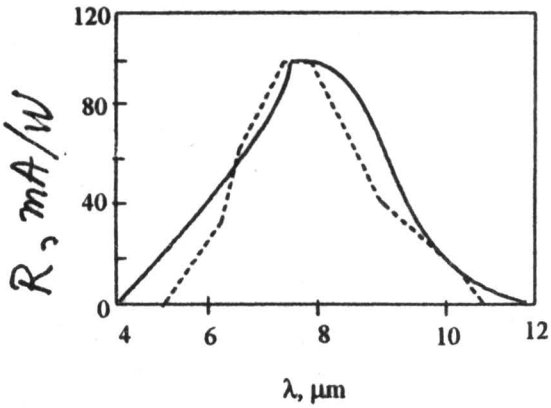


Fig. 5.36

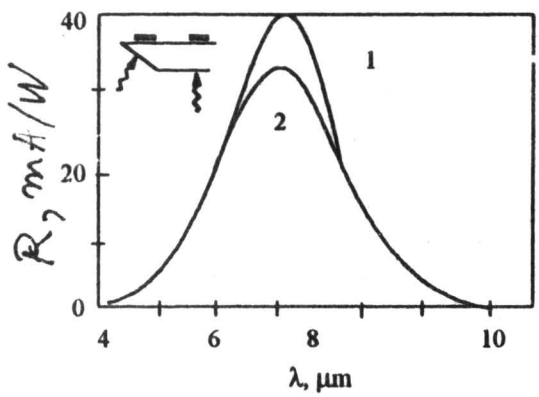


Fig. 5.377

face prin substrat aşa cum se reprezintă schematic în insertul din Fig.5.37 [23]. In cazul iluminării la incidenţă normală contribuie la tranziţii radiaţia de ambele polarizări, de aceea responsivitatea în acest caz este mai mare decât la iluminarea la 45°. Lumina polarizată s dă un răspuns fotoelectric de două ori mai mare decât lumina polarizată p. Dimpotrivă, în superreţelele de tip n răspunsul fotoelectric la lumina polarizată s este interzis din condiţii de simetrie. Dependenţa de temperatură a curentului de întuneric este exponenţială, $I_i \sim \exp(-\Delta E/kT)$, la fel ca în cazul superreţelelor de tip n. Notăm că deoarece în superreţelele de tip p este importantă mixarea golurilor uşoare cu cele grele pentru a permite absorbţia radiaţiei la incidenţă normală, şi că la k=0 această mixare se anulează, este necesar să dopăm puternic văile cuantice astfel ca vectorul de undă al electronilor la nivelul Fermi să fie suficient de

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

mare ceea ce permite mixarea la $k \neq 0$. In scopul obţinerii unei creşteri a absorbţiei la incidenţă normală fără a creşte concentraţia p de dopare,s-au construit superreţele cu văi de tip p asimetrice. Această asimetrie afectează mixarea din banda de valenţă. In Fig.5.38a este rprezentată superreţeaua de tip p simetrică iar în Fig.5.38 b este reprezentată o structura asimetrică (treaptă). In ambele cazuri există o singură stare legată în valea cuantică.In superreţeaua simetrică responsivitatea este independentă de polarizarea electrică pe când în cea asimetrică se obtine că la polarizare inversă responsivitatea este de 2,5 ori mai mare decât la polarizare directă. Aceasta se datorează asimetriei probabilităţii de captură pe starea fundamentală la cele două polarizări. Rezultatele experimentale au arătat că detectivitatea în supereţelele de tip n este cu mai mult decât de 5 ori mai mare decât în superreţelele de tip p, pentru aceeasi lungime de undă de prag.

5.8. *Detectori de radiaţie cu benzi de energie indirecte.*

Detectorii prezentaţi în paragrafele anterioare funcţionează în domeniul de lungimi de undă lungi (7-14 μm) precum şi în domeniul de lungimi de undă foarte lungi (>14 μm) al spectrului de infraroşu. Este important sa se realizeze detectori şi în domeniul lungimilor de undă medii (3-5 μm) din spectrul de infraroşu,unde există de asemenea o fereastră atmosferică. Pentru a creşte intervalul energetic dintre subbenzi si a ajunge în acest domeniu de lungimi de undă, este necesar să se crească înălţimea barierelor. Pentru a creşte înălţimea barierelor în $Al_xGa_{1-x}As$ trebuie să se crească x. Peste valoarea lui x=0,40-0,45 benzile de energie în $al_xGa_{1-x}As$ devin indirecte, adică minimul X al benzii de conducţie devine mai mic decât minimul Γ. Diagrama de benzi de energie pentru un detector cu superreţea cu bariere indirecte este prezentată în Fig.5.39 [24]. Structura conţine 50 de perioade, fiecare perioadă are o vale din GaAs cu L_v=3 nm şi o barieră din $Al_{0,55}Ga_{0,45}As$ cu L_b=50 nm. Structura este mărginită în părţile de jos şi de sus cu straturi de contact de 1 μm şi, respectiv, 0,5 μm grosime, din GaAs cu $N_D=10^{18}$ cm^{-3}. In Fig.5.39, linia plină reprezintă minimul Γ iar linia

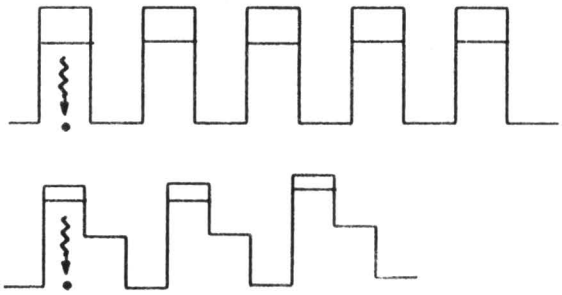


Fig. 5.38

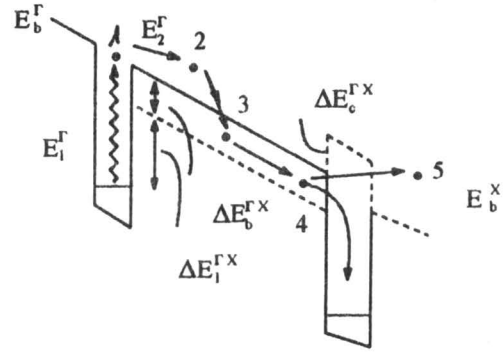


Fig. 5.39

întreruptă reprezintă minimul X.Starea legată $E_{1\Gamma}$ = 165 meV, înălţimea barierei $E_{b\Gamma}$=452 meV, maximul absorbţiei optice de la $E_{1\Gamma}$ la $E_{2\Gamma}$ (stare excitată din spectrul continuu) este $\Delta E_{12\Gamma}$=289 meV, care corespunde maximului absorbţiei la λ=4,3 μm. Funcţionarea detectorului este indicată schematic pe figură. Un electron excitat din $E_{1\Gamma}$ în $E_{2\Gamma}$ (No.1) este transportat deasupra barierei Γ (No.2). Până în acest punct procesul de excitare optică este

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

același ca într-un detector cu barieră cu benzi directe. Pentru bariera cu benzi indirecte minimul X se află cu $\Delta E_{b\Gamma X}$ =109 meV mai jos decât minimul $E_{b\Gamma}$. Deoarece timpul de împrăștiere din minimul Γ în minimul X, $\tau_{\Gamma X}$~0,1 ps, este mult mai scurt decât timpul de viață a electronului de energie mare din valea Γ, τ_{Γ}~40 ps, electronul excitat va fi împrăștiat rapid în minimul X (No.3), unde va fi transportat de către câmp în valea cuantică (No.4). Deși valea cuantică este astfel pentru electronii Γ ea este o barieră cu înălțimea ΔE_{bX}=133 meV pentru electronii X. Electronul din 4 va tunela în 5 daca timpul de tunelare τ_t va fi mai scurt decât timpul de recaptură τ_c în valea cuantică Γ. Pentru ca electronul din mininul X sa fie capturat în valea cuantică Γ trebuie mai întâi sa fie împrăștiat înapoi în minimul Γ. Pentru ca să existe un efect fotoelectric semnificativ, este necesar ca suma dintre timpul de împrăștiere înapoi în minimul Γ si timpul de recaptură pe nivelul fundamental din valea cuantică să fie mult mai mare decât timpul de tunelare τ_t. Suma celor doi timpi necesari pentru recaptură este în jur de 40 ps,iar τ_t=0,4 ps.Astfel, bariera X din GaAs este practic transparentă ceea ce conduce la o eficiență mai bună a detectorului în comparație cu cazul când bariera are benzi directe (bariera Γ). Responsivitatea în funcție de λ pentru structura menționată mai sus ,cu bariere indirecte din $Al_{0,55}Ga_{0,45}As$ este reprezentată în Fig.5.40, la polarizare directă,+4V,curba 1 și la polarizare inversă ,-4V,curba 2.Valoarea maximă este R=0,61A/W la λ_p=4,2 μm si la polarizare +4V și R=0,20 A/W la -4V. Alți autori au utilizat bariere din AlAs, care este semiconductor cu benzi indirecte [25]. S-au realizat și structuri cu văi din semiconductori cu benzi indirecte [26]. Acestea au avantajul că pot funcționa ca detectori la incidență normală pe strat deoarece aceasta este permisă în semiconductorii cu benzi indirecte.

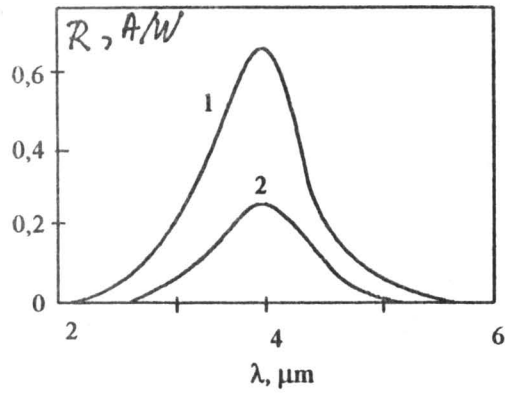


Fig. 5.40

5.9. *Detectori care funcționează pe baza efectului fotovoltaic*

Efectul fotovoltaic (la polarizare zero) apare în special în structurile puternic asimetrice, cum sunt cele cu bariere și văi gradate, cu văi în treaptă,sau minibenzi asimetrice. Totuși responsivitatea acestora la polarizare zero este foarte mică în raport cu responsivitatea la o tensiune aplicată. Am prezentat această problemă în paragraful dedicat structurilor asimetrice. O prezentare în detaliu cititorul o găsește în [27].

5.10. *Detectori care funcționează la mai multe lungimi de undă.*

Așa dupa cum am văzut în paragrafele precedente,în structurile cuantice maximul responsivității poate fi modificat în domeniul 2-20 μm (și chiar la lungimi de undă mai mari) prin modificarea lărgimii văii cuantice, a compoziției barierei de potențial și a structurii (văi în treaptă, văi și bariere gradate, văi cuplate). Avantajul structurilor cuantice constă în aceea că se pot construi pe același substrat mai multe superrețele, separate între ele printr-un

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

strat de contact din GaAs, fiecare superreţea fiind sensibilă într-un anumit domeniu spectral. De exemplu, în Fig.5.41 este reprezentata o structură a unui detector sensibil la două lungimi de undă, λ_1 şi λ_2, care contine 3 electrozi, astfel ca fiecare lungime de undă să poată fi detectată separat. S-au construit şi detectori care funcţioneaza pe trei sau mai multe lungimi de undă [28].

5.11. *Cuplajul optic.*

Aşa cum am observat anterior, deoarece forţa oscilatorului are componentă numai în direcţia x, a perioadei superreţelei, perpendiculară pe stratul văii cuantice, câmpul electric al radiaţiei trebuie să aibă de asemenea o componentă paralelă cu x pentru a induce o absorbţie intersubbenzi; prin urmare, radiaţia la incidenţă normala nu poate fi absorbita deoarece câmpul electric al undei este perpendicular pe direcţia ei de propagare. In paragrafele anterioare am văzut că această problema se rezolvă utilizând incidenţa sub unghiul de 45°. Insă în cazul reţelelor (sensorilor) de imagine (pe care le vom prezenta în paragraful următor), care constă dintr-un ansamblu de minidetectori construiţi pe acelasi substrat, pentru a reda imaginea unei suprafeţe este necesar ca radiaţia de pe suprafaţă să cadă normal pe aria sensorului. In acest caz se utilizează metode de reflexie a radiaţiei în interiorul structurii astfel ca aceasta sa treacă din nou prin superreţea însă sub un unghi adecvat incât să poată fi absorbită şi să genereze tranziţia intersubbenzi. Există mai multe posibilităţi: realizarea unei reţele de difracţie la contactul de deasupra sau pe substrat, realizarea unei suprafeţe a structurii reflectantă, rugoasă, astfel ca să aibă loc o reflexie aleatorie, multiplă, realizarea unei cavităţi optice precum si realizarea unor microlentile de focalizare a radiaţiei pe zona activă. Prezentăm în continuare aceste probleme.

5.11.1. Reţele optice de difracţie.

Reţelele de difracţie pot fi unidimensionale sau bidimensionale. Reţelele unidimensionale constă în gravarea (tăierea) unor caneluri paralele între ele in stratul de contact (din GaAs) de exemplu de deasupra structurii, aşa cum se reprezintă în Fig.5.42.

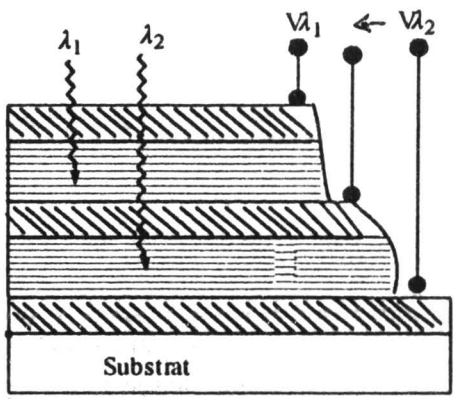


Fig. 5.41

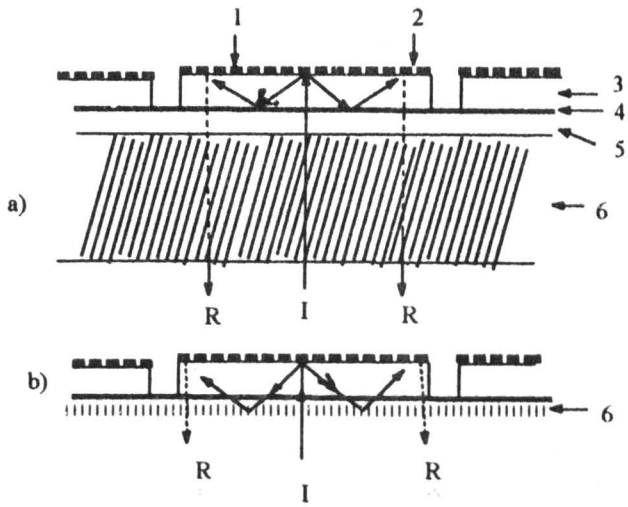


Fig. 5.42

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Aceste caneluri sunt separate între ele prin benzi (din stratul de contact, nedecupate). Peste aceste benzi se depune un strat de Au de 25 nm grosime, astfel că lumina incidentă prin substrat când ajunge la acest strat de la suprafaţă sa fie reflectată inapoi. Lăţimea unui canel precum şi cea a unei benzi este de 1,75 μm astfel că perioada reţelei de difracţie este 3,5 μm. Pentru ca radiaţia reflectată de către reţeaua optică de deasupra să nu iasă afară prin substrat (este vorba de partea de radiaţie care nu a fost absorbită de vaile cuantice) se mai adaugă structurii un strat reflector din AlAs, de grosime 3 mm, aşa cum se reprezintă în Fig.5.42a. Astfel radiaţia trece de două ori sub un unghi diferit de zero prin valea cuantică,ceea ce măreşte probabilitatea de absorbţie. Când ajunge a doua oară pe reţeaua optica,fiind incidentă sub un unghi θ, se reflectă pe direcţie perpendiculară si iese afară prin substrat. Reţeaua optică, de deasupra, împreună cu stratul reflector din AlAs, situat între substrat şi contactul n^+, formează ceea ce se numeşte o cavitate optică. In Fig.5.42 cifrele au următoarele semnificaţii: 1-reţeaua optică, 2-canel, 3-stratul detector din văi cuantice şi bariere, 4-stratul n^+ de contact (din partea de jos), 5-stratul reflector din AlAs, 6-substratul din GaAs. Intre unghiul θ de reflexie a radiaţiei incidente normal pe reţeaua optică, periada Λ a reţelei optice şi lungimea de undă λ_p' corespunzătoare maximului responsivităţii există relaţia

$$\lambda_p' = \Lambda \sin\theta \qquad (11.1)$$

λ_p' este lungimea de undă a radiatiei în mediul respectiv. Substratul din GaAs are grosimea de 650 μm. Dacă se micşorează grosimea substratului la valoarea de 25 μm şi se lustruieşte suprafaţa sa se obţine o suprafaţă reflectantă (împrăştiere aleatorie), fără a mai fi necesar sa se adauge stratul reflector din AlAs, aşa cum se reprezintă în fig.5.42b. Măsurătorile de responsivitate au arătat că pentru o reţea optică unidimensională (1D) la incidenţă normală pe substratul detectorului se obţine o valoare de 1,1 ori mai mare decât în cazul unui detector făra reţea optică la incidenţa la 45°.O creştere de două ori mai mare a resposivităţii se obţine atunci când se realizează o reţea optică bidimensională (2D). Reţeaua optică bidimensională se obţine prin gravarea (decuparea) din stratul de contact superior a unor pătrate cu latura s=2 μm şi adâncimea h=1 μm, separate între ele prin zone nedecupate cu lăţimea de 1 μm, astfel că perioada unei superreţele 2D este Λ=3 μm. In fig.5.43a se reprezintă vederea de sus a unei reţele optice 2D. Menţionăm că secţiunea transversală printr-un detector cu reeţea 2D este la fel cu cea reprezentată în Fig.5.42. Dacă se utilizează stratul reflector din AlAs (Fig.5.42a), cu un asemenea detector cu reţea optică 2D se obtine o responsivitate de ~ 7 ori mai mare decât cu detectorul fără reţea optică cu radiaţie incidentă la 45°.In Fig.5.44 se reprezintă dependenţa de perioada Λ a uneu reţele optice 2D, a maximului R_p al responsivităţii. Se observă că curba prezinta două maxime. Pe scala de sus a figurii este reprezentat $\sin\theta = \lambda_p'/\Lambda$ şi se observă că maximul la valori mici ale lui Λ se datorează cresterii coeficientului de absorbţie α când sinθ se apropie de valoarea unitate ($\alpha \sim \sin^2\theta/\cos\theta$). Maximul la valori mari ale lui Λ se datorează maximului eficienţei reţelei optice produsă de interferenţa coerentă între razele reflectate de suprafaţa de sus şi de suprafaţa de jos a reţelei optice (Fig.5.43b) care are loc atunci când

$$\lambda_p' = h(1+\cos\theta) + \frac{\Lambda}{2}\sin\theta \qquad (11.2)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde λ_p' este este lungimea de undă a radiației în mediu la valoarea maximă a lui R. Din cele doua ecuații (11.1) si (11.2) se obține pentru eficiența maximă a rețelei optice, relația

$$\lambda_p' = \frac{4h\Lambda^2}{4h^2 + \Lambda^2} \qquad (11.3)$$

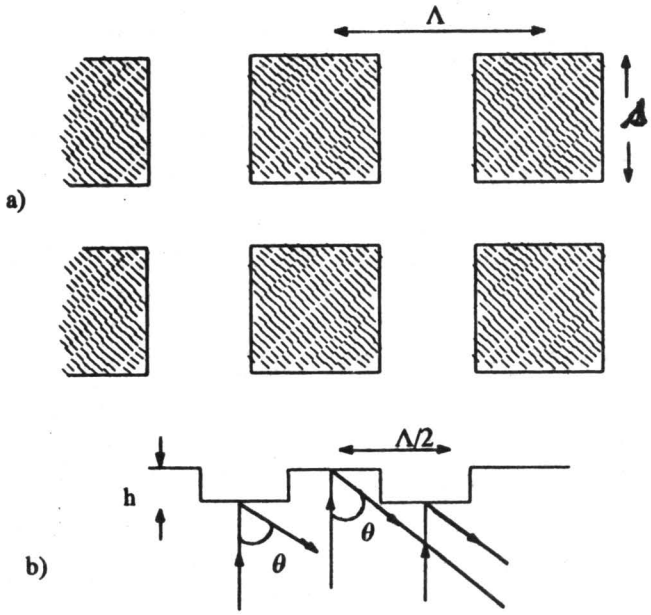


Fig. 5.43

Substituind λ_p=16,3 μm, indicele de refracție n_r=3,3 (adică $\lambda_p'=\lambda_p/n_r$=4,94 μm) și h=1,4 μm se obține Λ_{max}=7,7 μm, în bună concordanță cu valoarea corespunzătoare celui de al doilea maxim în Fig.5.43 [29]. Așa cum am amintit mai sus, pentru ca radiația să treacă de două ori prin valea cuantică și să crească absorbția se introduce un strat reflectant din AlAs. In aceste structuri substratul de GaAs este gros, 500 μm. In camerele video construite din InSb unde substratul este puternic absorbant nu se mai utilizează stratul reflectant din AlAs ci cavitatea optică se obtine prin utilizarea unui strat subțire, cu grosimea de 29 μm, bine lustruit.

Astfel se poate proceda și în cazul structurilor din GaAs, așa cum se reprezintă în Fig.5.42b. Prin subțierea substratului din GaAs la 29 μm și lustruirea acestuia se obține o responsivitate de aceeași valoare ca și în cazul utilizării stratului reflector din AlAs. Avantajul substratului subțire este acela că unghiul de reflexie limită la interfața GaAs cu aerul este θ_c=18° pe când unghiul limită la interfața AlAs cu GaAs este θ_c=60°. Prin urmare stratul subtire din GaAs lustruit, reflectă o bandă mai largă din spectrul de radiație.

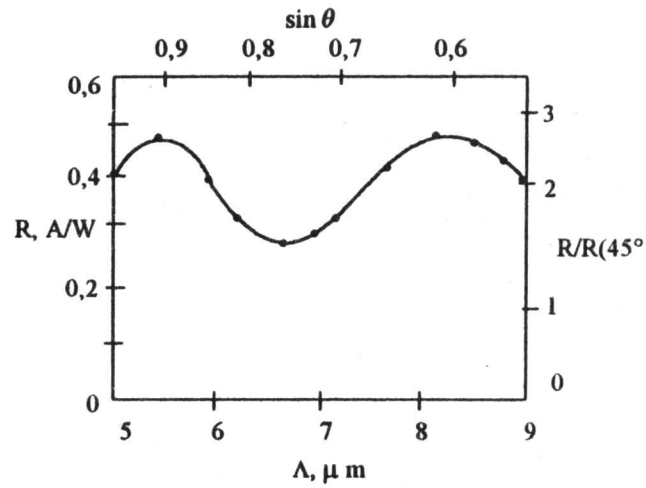


Fig. 5.44

5.11.2. Imprăștierea aleatorie.

Așa după cum am discutat mai sus, o rețea optică realizată pe fața de sus a detectorului are două avantaje: (a) permite iradierea la incidență normală pe substratul detectorului și (b) mărește de 2-3 ori responsivitatea față de cazul când nu există rețea optică si incidența este la 45°. Pentru ca radiația sa treacă de două ori prin superrețea și deci să

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

crească absorbţia, se realizează o cavitate optică, aşa cum se reprezintă în Fig.5.42, ceea ce determină o creştere a respon-sivităţii cu încă un factor 2. In cavitatea optică, radiaţa nu traversează valea cuantică decât de două ori. Pentru ca radiaţia infraroşie să efectueze mai multe drumuri prin superreţea şi deci absorbţia să fie mai puternică,suprafaţa reflectantă se face rugoasă (cu asperităţi). In acerst caz are loc o împrăştiere aleatorie a radiaţiei şi intensitatea creşte de $2n_r^2$ ori[30]. Prin urmare,cea mai mare parte din radiaţie poate fi captată în interiorul structurii (Fig.5.45) cu excepţia unei mici fracţiuni care iese în exterior în interiorul unui unghi de reflexie limită $\theta_c=18^\circ$ în GaAs, dat de expresia $\sin\theta_c=1/n_r$. Deoarece în detectorul cu văi cuantice $\alpha\sim\sin^2\theta$, medierea după unghi reduce această creştere de $2n_r^2$ cu

$$\frac{\int_0^\pi \sin^3\theta d\theta}{\int_0^\pi \sin\theta d\theta}=\frac{2}{3}$$

ceea ce dă o creştere a absorbţiei de $(4/3)n_r^2$ ori, egală cu 14 în GaAs. Evident că această creştere este mult mai mare decât în cazul reţelelor optice. Asperizarea suprafeţei se realizează tehnologic astfel. Pe suprafaţa pe care trebuie sa aibă loc împrăştierea aleatorie se gravează, utilizând o mască fotolitografică, celule pătrate, una lânga alta, fiecare celulă având trei nivele în adâncime. O celulă are laturile a=4,6-9,1 μm. O astfel de celulă este reprezentată în Fig.5.46a. Pătratul interior (regiunea 1) are adâncimea $\lambda_p'/2$ şi aria $a^2/4$, pătrul din mijloc (regiunea 2) are adâncimea $\lambda_p'/4$ şi aria $a^2/2$. Regiunea exterioară (3) de arie $a^2/4$ este la nivelul suprafeţei. Ariile şi adâncimile celor trei nivele au fost alese astfel din următoarele consideraţii. Radiaţia incidentă reflectată de către regiunea 3, acoperită cu Au, va fi în fază (cu o diferenţă de drum egală cu λ_p') cu radiaţia reflectată de către pătratul interior (1). Aceste două raze reflectate vor fi în opoziţie de fază (cu o diferenţă de drum de $\lambda_p'/2$) faţă de radiaţia reflectată de nivelul din mijloc (regiunea 2). Ariile de reflexie ale regiunilor unei celule, au fost alese astfel încât împrăştierile în fază şi cele în opoziţie de fază sa fie egale între ele astfel încât interferenţa de anihilare să fie maximă. Poziţia spatială a pătratului din mijloc (2) a fost aleasă aleatoriu (de la o celulă la alta) într-unul din colţurile celulei unitate iar poziţia pătratului interior (1) a fost de asemenea aleasă aleatoriu într-unul din colţurile pătratului din mijloc (2). Există astfel 16 combinaţii posibile. In Fig.5.46a se prezintă una din aceste combinaţii. Această distribuţie aleatorie a pătratelor (1) şi (2) de la o celulă la alta pe suprafaţa de împrăştiere se utilizează pentru a se evita suprapunerea spaţială a diverselor nivele de reflexie, care ar micşora împrăştierea. Un caz analog se întâlneşte la împrăştierea pe aprticule solide în suspensie; acestea se încapsulează pentru a se evita ca să se lipească între ele şi astfel să se micsoreze numărul de centri de

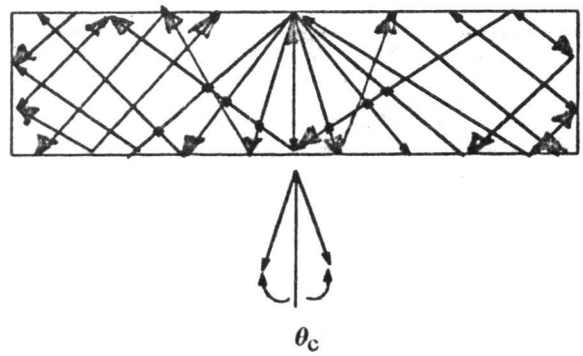


Fig. 5.45

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

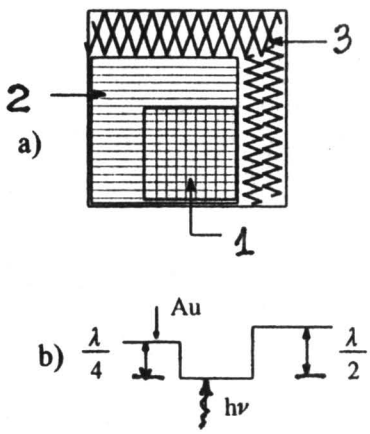


Fig. 5.46

împrăştiere.Pentru o superreţea cu 50 perioade cu L_v=7,2 nm (GaAs) şi L_b=60 nm ($Al_{0,11}Ga_{0,89}As$) cu faţa de deasupra reflectoare cu împrăştiere aleatorie s-a obţinut la incidenţă normală R_p=1A/W, de 5 ori mai mare decât în cazul incidenţei la 45% fără suprafată reflectantă.Acest rezultat se obţine în cazul grosimii substratului din GaAs de 650 μm. Dacă se utilizează un substrat subţire, de 25 μm, responsivitatea creşte de încă două ori. Responsivitatea este maximă pentru latura celulei unitate a=5,7 μm, corespunzând unui unghi de difracţie $\sin\theta = a/\lambda_p' = 0,9$. Creşterea responsivităţii este în acord cu estimarea teoretică de $(4/3)n_r^2$ ori.

5.11.3. Microlentile.

Am văzut mai sus că se poate mări cuplajul optic utilizând reţele optice bidimensionale, suprafeţe reflectante cu reflexie aleatorie şi cavităţi (ghiduri) optice. O creştere în plus a detectivităţii se obtine utilizând o reţea de microlentile [31]. In Fig.5.47 cu 1 sunt notate microlentilele iar cu 2 sunt notate ariile active ale detectorilor ci văi cuantice, care sunt separaţi între ei ca într-o reţea de imagine. Suprafaţa prin care intră radiaţia incidentă la un detector poartă numele de pixel în reţeaua de imagine. In fiecare pixel este construita o microlentilă. O microlentilă focalizează pe aria activă a detectorului cu văi cuantice toată radiaţia incidentă pe aria unui pixel (care este mai mare decât a detectorului). Deşi se obţine aceeaşi responsivitate ca şi în absenţa microlentilelor, totuşi există avantajul că se obţine un curent de întuneric micşorat cu raportul dintre aria activă şi aria pixelului. Detectivitatea, la lungimea de undă corespunzătoare maximului,este dată de relaţia

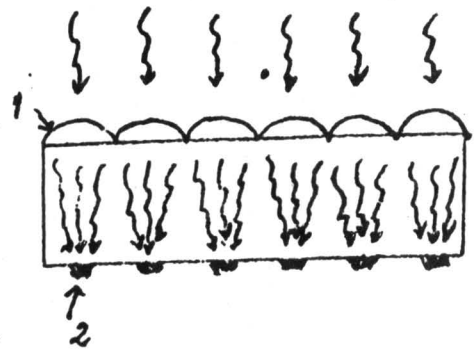


Fig. 5.47

$$D_\lambda^* = \frac{R_p\sqrt{A\Delta f}}{i_z}$$

unde A este aria detectorului, Δf= 1 Hz este banda de frecvenţă iar i_z este curentul de zgomot care, atunci când este limitat de zgomotul curentului de întuneric, este dat de expresia

$$i_z = \sqrt{<i_z^2>} = \sqrt{4qI_i g\Delta f}$$

unde $<i_z^2>$ este valoarea pătratică medie a curentului de zgomot, I_i este curentul de întuneric, iar g este coeficientul de amplificare definit în paragrafele anterioare. Diametrul spotului focalizat pe aria activă este dat de expresia

$$d = \frac{F}{n_r f} \qquad (11.1)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde

$$F = \frac{rn_r}{n_r - 1}$$

este distanţa focală a lentilei; r este raza de curbură a microlentilei,n_r este indicele de refracţie şi f este numărul sistemului optic (adică al lentilei obiectivului). Curentul de întuneric se micşorează şi deci detectivitatea creşte cu raportul dintre aria pixelului şi aria acestui spot. Dacă notăm diametrul pixelului cu D această micşorare este de

$$G = (\frac{D}{d})^2 = (\frac{Dn_r f}{F})^2 \qquad (11.2)$$

ori. Un alt efect care trebuie luat în considerare este fenomenul de difracţie de la microlentile. Diametrul unui disc Airy pentru detectorul considerat este $2{,}44\lambda F/n_r D$, unde λ este lungimea de undă a radiaţiei în vid şi dacă se ia aceasta egală cu diametrul detectorului,se obţine relaţia

$$D=2{,}44\lambda f \qquad (11.3)$$

Această relaţie arată că numărul f determină diametrul D al pixelului (sau vice-versa) şi acesta determină, prin intermediul relaţiei (11.2),factorul de micşorare a curentului de întuneric. De exemplu, dacă f=2 şi λ=10 μm atunci dmensiunea corespunzătoare a pixelului este D=50 μm. Dacă distanţa focală a microlentilei este F=50 μm, atunci din ec.(11.1) rezultă pentru diametrul spotului d=8 μm şi din ec.(11.2) rezultă o micşorare a curentului de întuneric de mai mult de 40 ori. Menţionăm că rezultatul este acelaşi dacă microlentilele funcţionează în aer sau în mediu semiconductor deoarece $F \sim n_r$ şi $\lambda \sim 1/n_r$.

5.12. Reţele (sensori) de imagine.

Sensorul de imagine transformă variaţia spaţială a imaginii optice incidente (de exemplu lumina reflectată de către imaginea originală) într-un semnal video variabil în timp [1]. Pentru a reda dependenţa spaţială, sensorul de imagine este o reţea de detectori de arie foarte mică, separaţi între ei, integrati pe aceeaşi plachetă,aşa cum se reprezintă în fig.5.48. Notaţiile de pe figură au următoarele semnificaţii:1-multiplexer din Si, 2-proieminenţe pentru cuplare, 3-suprafaţă de reflexie prin împrăştiere aleatorie, 4-detectorul cu văi cuantice, 5-răşina izolatoare,6-contactul metalic pentru conexiune la masă, 7-spaţiu cu aer sau răşină, 8-microlentile. O asemenea reţea poate

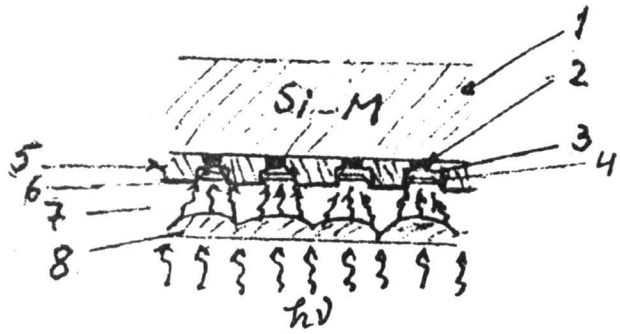


Fig. 5.48

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

separaţi între ei, fiecare pixel constituind zona de intrare a radiaţiei într-unul din detectori.Cuplajul optic se realizează cu suprafaţa cu reflexie aleatorie şi cu microlentile,astfel că iluminarea se face la incidenţă normală pe suprafaţa reţelei.In plus,utilizarea microlentilelor micşorează curentul de întuneric de ~40 ori. Procesul de fabricaţie cuprinde următoarele etape: (1) realizarea reflectorului din Gaas cu împrăştiere aleatorie şi decuparea (în substrat) a canelurilor dintre pixeli; (2) realizarea proeminenţelor pentru cuplarea reţelei la multiplexerul din siliciu; (3) umplerea canelurilor cu răşină; (4) subţierea şi îndepărtarea unor părţi din substratul din GaAs, pentru ca pixelii individuali să fie complet separaţi unul de altul (deoarece canelurile au fost decupate în substratul iniţial) ;notăm că este necesară subţierea până la grosimea de 6 μm; (5) depunerea metalului pentru contactul ohmic de deasupra; (6) ataşarea reţelei de microlentile,separate de pixeli printr-un strat de aer sau de răşină. Avantajul pixelior separaţi este obţinerea unei eficienţe cuantice mari,deoarece practic întreaga radiaţie este captată. De asemenea, se elimină problemele legate de diferenţa dintre coeficienţii de dilatare ai substratului din siliciu şi văilor cuantice din GaAs, ceea ce dă posibilitatea să se construiască reţele cu un număr mare de pixeli [32,33]. Detectorul funcţionează prin tranzitia de pe o stare legată pe stări din spectrul continuu şi constă dintr-o superreţea cu 50 perioade, fiecare perioadă conţine o vale cuantică cu L_v=4 nm din GaAs dopat cu $N_D=10^{18}$ cm^{-3} şi o barieră din $Al_{0,27}Ga_{0,73}As$ cu L_b=50 nm.Are responsivitatea R=0,21A/W la lungimea de undă de pic λ_p=8,6 μm şi lungimea de undă limită λ_c=9,6 μm. Eficienţa cuantică este de 13%. Temperatura de funcţionare este 65K. Dimensiunile unui pixel sunt de 50 μm. Rata cadrelor imaginilor video este se 109 Hz şi se utilizează un muiltiplex cu capacitatea de încărcare de 4.10^7 electroni. Se speră ca într-un viitor foarte apropiat să se obtină reţele de imagine cu văi cuantice care să aibă aceleaşi performanţe cu ale reţelelor imagine construite din HgCdTe. O problemă importantă este cea a uniformităţii pixelilor. Neuniformităţile limiteză performanţele detectorilor printr-un factor de zgomot. Diferenţa de temperatură echivalentă de zgomot este direct proporţională cu neuniformitatea u, atunci când aceasta joacă rolul dominant asupta zgomotului

$$(\Delta T)_z = \frac{u\bar{\lambda}T_a}{1,44}$$

unde $\bar{\lambda} = (\lambda_1 + \lambda_2)/2$ exprimat în cm,este lungimea de undă medie în banda spectrală de la λ_1 la λ_2,T_a este temperatura mediului ambiant în K iar termenul de la numitor reprezintă hc/k_B=1,44 cm.K. De exemplu la T_a=300K, $\bar{\lambda}$ = 10 μm, u=0,1% se obţine $(\Delta T)_z$=63K pe când dacă neuniformitatea scade la 0,01% se obţine $(\Delta T)_z$=6,3K.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

1.V.Dolocan, Fizica joncțiunilor cu semiconductoare, Ed.Academiei,1982.
2.F.R.Arams ,Infrared-to milimeter wavelength detectors, Artech House Inc.Dedham,1973.
3.P.W.Kruse, Optical and infrared detectors, Topics in Applied Physics, vol.19,Springer-Verlag,1977.
4.R.H.Kingston, Detection of optical and infrared radiation, Springer-Verlag,1978.
5.L.Esaki, H.Sakaki, IBM Tech.Disc.Bull.10,2456(1977).
6.L.C.west, S.J.Eglash, Appl.Phys.Lett.46,1156(1985).
7.B.f,Levine, K.K.Choi, C.G.Bethea, J.Walker, R.J.Malik, Appl.Phys.Lett.50,1092(1987)
8.K.W.Goossen, S.A.Lyon, Appl.Phys.Lett.47,1257(1985).
9.L.J.Kozlovsky et al, IEEE Trans.Electron.Devices,ED-38,1124(1991).
10.H.C.Liu, G.C.Aess,M.Buchanan, Z.R.Wasilevsky, D.Landheer, J.Appl.Phys.70,935 (1991).
11.E.Rosencher, F.Luc, Ph.Bois, S.Delaitre, Appl.Phys.Lett.61, 468(1992).
12.K.Bandara, B.Levine, R.Leibenguth, M.T.Asom, J.Appl.Phys.74,1826(1993).
13.K.Bandara, B.Levine, J.Kuo, Phys.Rev.B48,7999(1993).
14.H.C.Liu, M.Buchanan,G.C.Aers,Z.R.Wasilevsky, Semicond.Sci.Technol.6,C124 (1991).
15.15.K.Bandara, B.Levine, M.Asom, J.Appl.Phys.74,346(1993).
16.K.Choi, B.levine, R.Malik, J.Walker, C.Bethea, Phys.Rev.B35,4172((1987).
17.K.Choi, B.Levine, C.Bethea, J.Walker, R.Malik, Phys.Rev.Lett.59,245991987).
18.K.Choi, B.Levine, C.Bethea, J.Walker, R.Malik, Appl.Phys.Lett.52,1979(1988).
19.A.Zussman, B.F.Levine, J.M.Kuo, J de Jong, J.Appl.Phys.70,5101(1991).
20.B.F.Levine, J.Appl.Phys.74,R1(1993).
21.J.M.Gerard, B.Deveaud, A.Regreny, Appl.Phys.Lett.63,240(1993).
22.B.F.Levine ,S.D.Gunapola, M.Hong, Appl.Phys.Lett.59,1969(1991).
23.B.F.Levine, S.D.Gunapola, R.F.Kopf, S.S.Fei, S.Hui, Appl.Phys.Lett.59,1864(1991).
24.B.F.Levine, S.D.Gunapala, R.F.Kopf, Appl.Phys.Lett.58,1551(1991).
25.H.Schneider, F.Fuchs,B.Dischler, J.Ralston, P.Koidl,Appl.Phys.Lett.58,2234(1991).
26.L.Yu,S.Li, P.Ho, M.Manasreh, J.Appl.Phys.74,1382(1993).
27.E.Rosencher, Ph.bois, Phys.Rev.B44,11325(1991).
28.K.Kheng, M.Romsteiner, H.Schneider, J.Ralston, F.Fuchs, P.Koidl, Appl.Phys. Lett.61, 666 (1992).
29.Quantum well intersubband transition physics and devices, ed.H.C.Liu, B.F.Levine, J.Y.Andreson, Plenum Press,1994.
30.E.Yablonovitch, G.d.gody ,IEEE Trans. Electron Devices, ED-29,300(1982).
31.N.T.gordon, Semicond.Sci.Technol.6,C106(1991).
32.B.F.Levine, C.G.Bethea, K.G.Glogovsky, J.W.Stait, R.E.Leibenguth, Semicond.Sci. Technol. 6, C114(1991).
33.T.S.Faska, J.W.Little, W.A.Beck, K.J.ritter, A.C.Goldberg, R.Leblanc în Inovative Long Wavelength Infrared Detector Workshop, Pasadena CA, April 7,8, 1992.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Capitolul VI

Fenomene de transport al curentului electric în structurile cuantice.

6.1. *Mobilitatea purtătorilor de sarcină în cazul transportului paralel cu suprafața stratului subțire.*

Mobilitatea purtătorilor de sarcină este limitată de către mecanismele de împrăștiere.Acestea sunt studiate în detaliu în semiconductorii masivi atât teoretic cât și experimental. Se cunosc următoarele contribuții importante:împrăștierea pe fononi acustici datorată potențialului de deformație;împrăștierea pe fononi acustici datorată câmpului piezoelectric (compușii III-V și II-VI sunt piezoelectrici datorită absenței simetriei la inversie); împrăștierea pe fononi optici; împrăștierea pe impurități ionizate; împrăștierea pe impurități neutre. In Fig.6.1 se reprezintă dependența de temperatură a mobilității în cazul contribuțiri fiecărui mecanism separat precum și în cazul acestora combinate. Simbolurile de pe figură au următoarele semnificații: IN-impurități neutre; PE-piezoelectrică; PD-potențial de deformație; P-polară; II-impurități ionizate; C-combinată. Pe curbă sunt reprezentate cu cerculețe rezultatele experimentale obținute în GaAs de înalta puritate [1]. Există o concordanță foarte bună între teorie și rezultatele experimentale. Se observă că la temperaturi joase domină împrăștierea pe impurități ionizate (N_D-N_A) pe când la temperaturi înalte domină împrăștierea pe fononi optici. Menționăm că deoarece la împrăștiere domină un mecanism sau altul, inversul mobilității totale este egal cu suma inverselor mobilităților componente. In GaAs masiv dopat mobilitatea depinde de concentrația impurităților puțin adânci chiar la temperatura camerei. De asemenea, în unele experiențe optice împrăștierea pe impurități ionizate poate fi total înlăturată chiar la temperaturi joase (4K) prin neutralizarea impurităților ionizate de către electronii și golurile generate optic. In acest fel s-a obținut o mobilitate a electronilor de ordinul $2.10^6 cm^2/V.s$ în GaAs masiv, de același ordin de mărime cu cea obținută în cazul gazului de electroni bidimensional. In heterojoncțiuni sau în văi cuantice se manifestă în plus față de mecanismele de împrăștiere menționate mai sus, următoarele mecanisme: împrăștierea pe fononii din

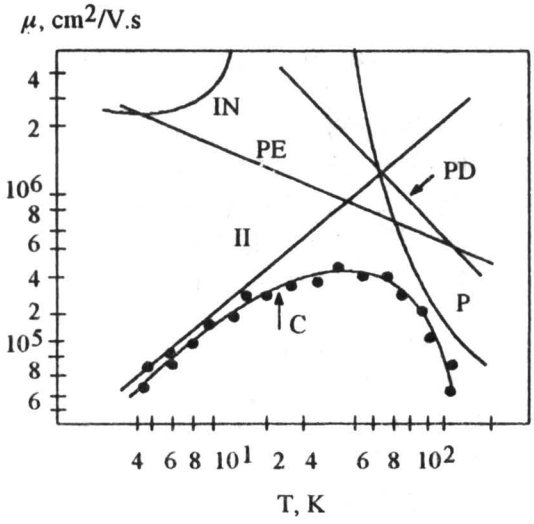


Fig. 6.1

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

AlGaAs; împrăștierea pe impuritățile neutre sau ionizate localizate în materialul ce constituie barierele (care sunt separate spațial de purtătorii din valea cuantică; aceasta din urmă constituie canalul în cazul tranzistorului cu efect de câmp); împrăștierea pe dezordinile din aliaj, fie din materialul barierei în cazul structurii AlGaAs/GaAs, fie din canal,atunci când canalul este un aliaj ca în cazul structurii InP/GaInAs sau din ambele,ca în cazul structurii GaInAs/AlInAs, împrăștierea pe fononii de la suprafață, noi moduri de propagare la suprafață care există la interfață (Totuși, deoarece materialele au în mod uzual densități și funcții dielectrice similare, aceste moduri fononice nu dau contribuție mare la împrăștiere și deci nu sunt luate în considerare); împrăștierea pe neregularitățile de la interfață; împrăștierea intersubbenzi înte nivelele cuantificate din canal. Mecanismele de împrăștiere pe fononi a purtătorilor de sarcină din valea cuantică nu se modifica semnificativ față de semicondutorul masiv. Imprăștierea pe impuritățile neutre și ionizate din valea cuantică joacă rol important atunci când aceasta este dopată. Un rol important îl joacă împrăștierea purtătorilor din valea cuantică datorită interacției Coulomb cu impuritățile din barieră, deoarece aceasta este puternic dopată.Imprăștierea intersubbenzi are loc la densități mari ale purtătorilor de sarcină când pot fi populate nivelele superioare (n=2,3,..). Mobilitate mare a electronilor, peste $10^7 cm^2/V.s$, s-a obținut în structurile cu dopare modulată. Cel mai reprezentativ dispozitiv care funcționează pe baza transportului paralel cu interfața este tranzistorul cu efect de câmp,pe care-l vom prezenta în detaliu într-unul din paragrafele următoare.

6.2. *Transportul purtătorilor de sarcină perpendicular pe interfață.*

In materialul masiv, mișcarea electronului în banda de conducție E(**k**) este descrisă de ecuațiile semiclasice

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}}; \quad \hbar\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} = -q\mathbf{F}$$

In câmp electric, **F**, continuu , vectorul de unda variază liniar cu timpul

$$\mathbf{k}(t)=\mathbf{k}(0)-q\mathbf{F}t/\hbar$$

Energia electronului se modifică după curba de dispersie E(**k**) și ,de asemenea, viteza se modifica după curba **v**(**k**). In Fig.6.2 se reprezintă structura de benzi de energie (în partea de sus) iar în partea de jos se reprezintă viteza electronului v, în prima zonă Brillouin, în cazul unidimensional, pentru componeta $k_x \equiv k$ a lui **k**. S-a considerat expresia energiei de forma $E=E_0+E_1$ coska, unde a este constanta rețelei cristaline.Pentru această curbă de dispersie a energiei se obține (pentru k(0)=0)

$$v = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k} = \frac{aE_1}{\hbar}\sin\left(\frac{qFa}{\hbar}t\right)$$

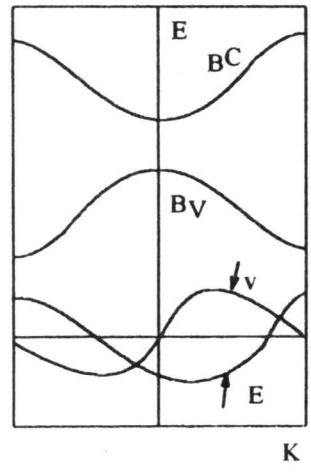


Fig. 6.2

Indata ce electronul a atins punctul k_B de la marginea zonei Brillouin, el este reflectat Bragg în sens opus, adică apare în punctul $-k_B$. Rezultă că v(k) este o funcție oscilatorie în raport cu timpul,cu perioada egală cu timpul necesar ca electronul să traverseze zona Brillouin,

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

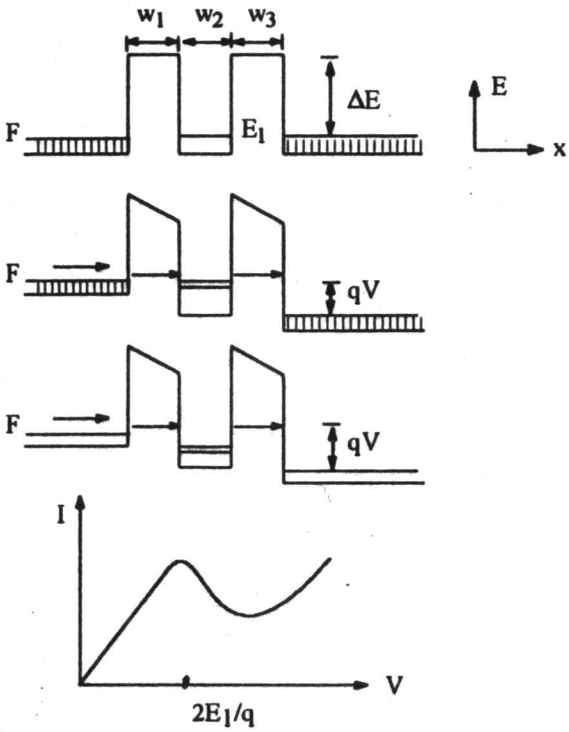


Fig. 6.3

$T=(2\pi/a)(qF/\hbar)^{-1}$. Mişcarea în spaţiul real va abvea aceeaşi frecvenţă, astfel că se obtine un oscilator foarte rapid,numit oscilator Bloch. Pentru ca sa se obţină oscilatorul Bloch este necesar ca perioada T a oscilaţiilor Bloch să fie mai mică decât timpul dintre două coliziuni consecutive ale electronului cu impurităţile sau cu vibraţiile reţelei ,care se numeşte timp de relaxare şi este de ordinul 10^{12}-10^{13}s. Pentru a=0,35 nm, F=10 kV/cm, se obţine $T=10^{11}$s care este mult mai mare decât timpul de relaxare şi prin urmare, într-un cristal obişnuit nu se pot obţine oscilaţii Bloch. Dacă se creşte câmpul electric apare generarea purtătorilor de sarcină liberi prin ionizare prin coliziune şi multiplicare în avalanşă şi deci nici în acest caz nu se atinge condiţia de apariţie a oscilaţiilor Bloch. Condiţia de apariţie a oscilaţiilor Bloch se obţine într-o superreţea, care are perioada d de 10 până la 50 ori mai mare decât a reţelei cristaline. Astfel, perioada T a oscilaţiilor Bloch scade la 10^{-12}-10^{-13}s şi poate fi mai mica decât timpul de relaxare a electronilor.Să considerăm o superreţea infinită. Se poate calcula viteza de drift a electronilor utilizând o metodă clasică. Variaţia vitezei în intervalul de timp dt este dată de expresia

$$dv = \frac{qF}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}dt$$

unde v, F şi k reprezintă componentele după direcţia x ale vectorilor corespunzători.Viteza medie de drift determinata de procesele de împrăştiere care au loc cu frecvenţa τ^{-1} este

$$v_d=\int_0^\infty e^{-t/\tau}dv = \int_0^\infty \frac{qF}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}e^{-t/\tau}dt$$

$\partial^2 E/\partial k^2$ este funcţie de t deoarece k este funcţie de t. Presupunând o dependenţă sinusoidala a lui E de k de forma $E=E_o+E_1$ coskd se găseşte

$$v_d = \frac{\pi\hbar}{m^* d}\frac{\xi^2}{1+\pi^2\xi^2}$$

unde $\xi = qF\tau d/\pi\hbar$ şi $1/m^* = (1/\hbar^2)(\partial^2 E/\partial k^2)$. Această relaţie a fost găsită de către Esaki şi Tsu.v_d în funcţie de F prezintă un maxim la $\pi\xi=1$ şi peste aceasta valoare, prezinta rezxitenţă diferenţială negativă. Se constată că valoarea lui F necesară pentru a obţine

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

rezistenţă negativă este de ~6 ori mai mică decât valoarea lui F necesara pentru a obţine oscilaţii Bloch. Expresia vitezei de drift scrisă mai sus este valabilă într-o superreţea infinităunde există benzi de energie si deci se referă la o banda de energie a electronilor. Dacă structura conţine un număr finit de văi cuantice şi bariere, atunci transportul perpendicular al

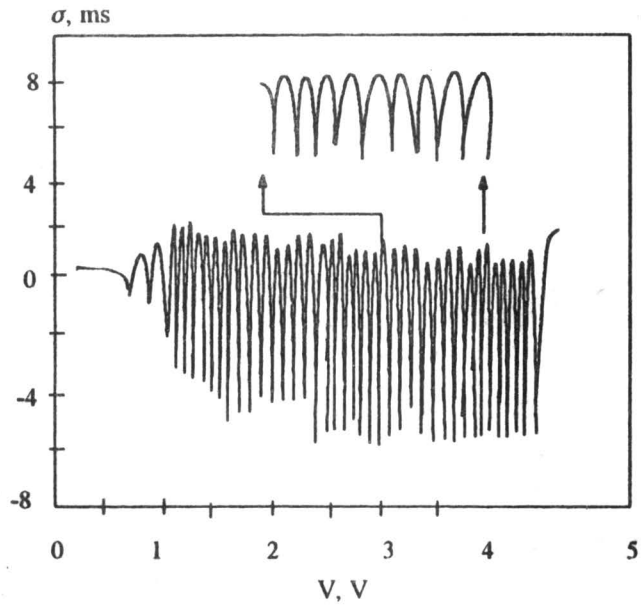


Fig. 6.4

curentului are loc prin efectul tunel rezonant. Aşa cum se prezinta în Fig.6.3, efectul tunel într-o structura cu barieră dublă conduce la o regiune cu rezistenţă diferenţiala negativa în caracteristica I-V [3]. Electrodul din stânga emitorului este din GaAs cu concentraţia donorilor $N_{D1}=10^{18}cm^{-3}$ iar electrodul din dreapta,colectorul este construit tot din GaAs şi are aceeaşi concentraţie de dopare ca şi emitorul. In valea cuantică concentraţia donorilor este $10^{17}cm^{-3}$. Grosimile straturilor barierelor şi văilor au valorile $w_1=w_2=w_3=5$ nm. In valea cuantica există un singur nivel de energie E_1 corespunzător stării n=1. Tunelarea rezonantă are loc la $V=2E_1/q$. Factorul 2 apare deoarece tensiunea se distribuie în mod egal pe cele două bariere,presupuse identice. Teoria simplă a fenomenului de tunelare a fost elaborată de către Tsu si Esaki [4]. Contactele de emitor si de colector sunt considerate ca nişte rezervoare de electroni distribuiţi conform statisticii Fermi-Dirac; diferenţa dintrre nivelele Fermi este egala cu tensiunea aplicată înmulţită cu sarcina electronului. Deoarece transmisia depinde numai de mişcarea perpendiculară pe interfeţe este posibil sa grupam stările care au aceeasi energie pentru mişcarea perpendiculară dar energie cinetica diferita pentru mişcarea paralelă

$$N(E_x)=\int_0^{\infty} dE_t \frac{\rho(E_t)}{1+\exp(\frac{E_x+E_t-E_F}{kT})}=\frac{kTm^*}{L_x\pi\hbar^2}\ln[1+\exp(\frac{E_F-E_x}{kT})] \qquad (2.1)$$

$N(E_x)$ se numeşte adesea funcţie de "alimentare" Densitatea curentului electric de la stânga la dreapta se scrie

$$j_{sd}=q\sum_{k_x>0}\frac{\hbar k_x}{m}T_{sd}(E_x)N(E_x)=\frac{q}{2\pi\hbar}\int_{E_c}^{\infty}T_{sd}(E_x)N(E_x)dE_x$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Am utilizat relaţia $\sum_{k_x} = (\frac{1}{2\pi / L_x})\int dk_x$.

E_c este marginea inferioară a benzii de conducţie din emitor. O expresie similară se scrie pentru densitatea de curent de la dreapta la stânga j_{ds}.Densitatea de curent net este dată de expresia

$$j = j_{sd} - j_{ds} = \frac{q}{2\pi\hbar}\int_{E_c}^{\infty} T(E_x)[N_e(E_x) - N_c(E_x)]dE_x$$

unde N_e şi N_c sunt funcţiile de "alimentare" de la emitor şi, respectiv,de la colector. Am tresupus că transmisia de la stânga la dreapta are aceeaşi valoare cu transmisia de la dreapta la stânga. La o tensiune V aplicată se obţine

$$j = \frac{qm^* kT}{2\pi^2\hbar^3}\int_{E_c}^{\infty} T(E)\ln[\frac{1+\exp(\frac{E_F - E}{kT})}{1+\exp(\frac{E_F - E - qV}{kT})}]dE \qquad (2.2)$$

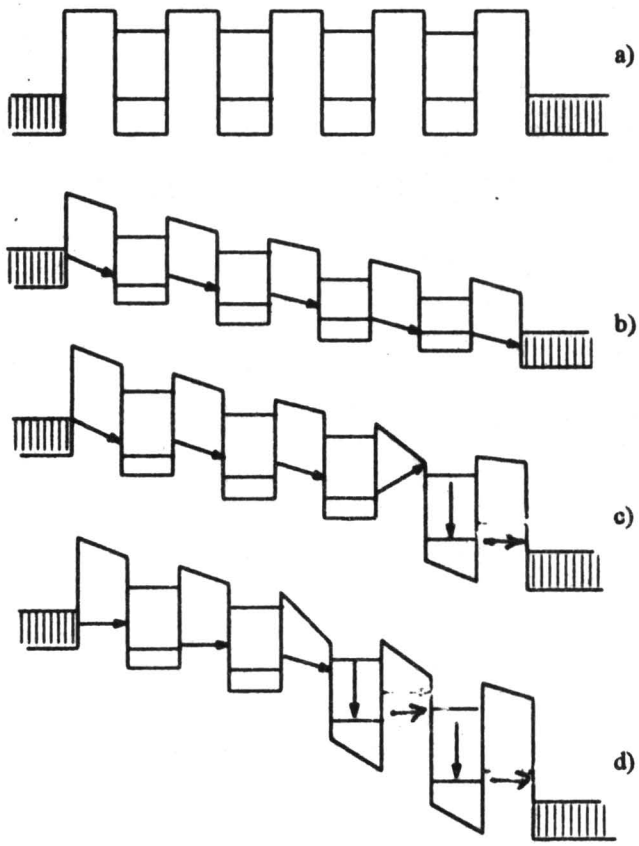


Fig. 6.5

La tensiuni aplicate mari ,$qV >> (E_F - E_c)$ şi $qV >> kT$, se poate neglija curentul de la dreapta la stânga, numitorul de la argumentul logaritmului din expresia (2.2) devine egal cu unitatea şi curentul devine dependent de tensiune numai prin variaţia transmisiei cu creşterea tensiunii pe bariera dublă. Are loc o scadere rapidă a curentului atunci când nivelul E_1 din valea cuantică trece trece sub marginea inferioara a benzii de conducţie din emitor. Expresia (2.2) descrie destul de bine caracteristica I-V în domeniul de tensiune unde are loc tunelarea rezonantă intensă, adică în regiunea maximului curentului, care are loc la o tensiune egală cu $2E_1/q$. Pentru raportul dintre curentul de pic şi cel de vale, I_p/I_v, s-a găsit valoarea 3,9 la temperatura camerei si 14 la 77K [5-7], pentru structuri cu bariera dublă pe bază de $Al_xG_{1-x}As/GaAs$.Un raport mai mare, I_p/I_v=30, la temperatura camerei s-a obţinut în structuri AlInAs/GaInAs. Rezultatele experimentale au pus în evidenţă faptul că curentul de vale are o valoare mult mai mare decât cea estimată din relaţiile teoretice. Aceasta demonstrează faptul că in afara procesului de tunelare coerentă, discutat mai sus, au loc şi

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

procese de tunelare incoerentă, în care electronii din emitor tuneleaza în valea cuantică asistaţi de unele interacţiuni cu fononii optici, fononii acustici, impurităţile, dezordinile aliajului, neregularităţile de interfaţă. In regiunea de rezistenţă diferenţială negativă dioda cu barieră dublă este instabilă. Dacă dioda este introdusă într-un circuit rezonant sau o cavitate ,atunci ea funcţionează ca generator de oscilaţii la frecvenţa caracteristică generatorului. De asemenea, dioda poate funcţiona ca un element bistabil.bistabilitatea are loc între următoarele două stări: starea de curent intens care are loc la o polarizare la care prin nivelul din valea cuantică este transportat un curent tunel rezonant şi starea de curent slab în care curentul este transportat numai pe baza proceselor de tunelare incoerente. Să considerăm acum o structura multiplă care constă din 49 de perioade cu grosimea văii din GaAs L_v=7,6 nm şi grosimea barierei, din $Al_{0,27}Ga_{0,73}As$,L_b=8,8 nm. Pentru a micşora densitatea stărilor de interfaţă se dopează cu Si ($N_D=3.10^{17}cm^{-3}$) numai centrele văilor, pe o lărgime de 5,6 nm. Straturile pentru contact ohmic au grosimea de 0,5 μm (contactul de sus) şi, respectiv, 1 μm, contactul de jos şi sunt dopate cu $N_D=10^{18}cm^{-3}$. Contactele ohmice sunt de formă circulară, cu diametrul de 50 μm. Caracteristica I-V se măsoară utilizând un analizor parametric HP4145 pentru polarizare pozitivă (semnul plus la contactul de sus). Caracteristica I-V a structurii la 20K este reprezentată în Fig.6.4 [8]. Se observă că apar 48 de maxime şi regiuni de rezistenţă diferenţiala negativă separate unul de altul la un interval de tensiune de 85±18 mV. Inainte de a ne ocupa de această comportare periodică în caracteristica I-V vom analiza efectul tunel rezonant sucesiv pe nivelel fundamentale,din fiecare vale cuantică,ce are loc la tensiuni aplicate mici [9]. In principiu, datorită naturii bidimensionale (2D) a gazului electronic în valea cuantică de potenţial, efectul tunel rezonant este posibil numai atunci când nivelele de energie din toate văile coincid între ele (se află la acelaşi nivel). In prezenţa câmpului electric această condiţie nu poate fi satisfăcută. Totuşi este posibil efectul tunel rezonant si în aceasta situaţie dacă în fiecare vale depotenţial are loc împrăstierea electronilor pe fononi sau pe impurităţi, astfel ca sa fie satiosfăcute legile de conservare ale energiei si impulsului. Pentru a fi posibil efectul tunel rezonant este necesar ca să fie satisfăcută condiţia $qV_p << \hbar / \tau_1$, unde V_p este difernţa de potenţial pe o perioada între două vai adiacente şi τ_1 este timpul de relaxare a electronilor, prin imprăştiere, la starea fundamentală. Prin urmare, la tensiuni mici este posibilă tunelarea rezonantă între stările fundamentale ale văilor cuantice. Primul maxim al conductanţei diferenţiale negative apare la V_b=0,35V şi corespunde întreruperii tunelării rezonante la $qV_p=2\hbar / \tau_1$. Presupunând ca la tensiuni mici diferenţa de potenţial este uniform distribuita pe dispozitiv rezultă $V_p=V_b/50$=7 meV si deci $\tau_1=10^{-13}$s. Prin urmare,pentru V_p<0,35V, când este satisfăcuta condoiţia de tunelare rezonantă, curentul total care circulă prin structură este dat de expresia $I=I_{ts}+I_{ti}+I_{tf}$ unde I_{ts} este curentul de tunelare rezonantă succesivă, I_{ti} este curentul de emisie termoionică iar I_{tf} este curentul de tunelare asistat de fononi (care are valoare mică).Primele două contribuţii se scriu [8]:

$$I_{ts} = \frac{qA}{\hbar L_v^2} T(V_p) k_B T \ln\left(\frac{1+e^{E_F/k_BT}}{1+e^{(E_F-qV_1)/k_BT}}\right)$$

$$I_{ti} = \frac{q^2 m}{\pi\hbar^2} \frac{Av_d}{L_v} V_1 e^{-(U_b-qV_2-E_F-E_1)/k_BT}$$

unde A este aria dispozitivului, V_1 este căderea de tensiune pe o barieră, E_F este nivelul Fermi, m este masa efectivă a electronului în $GaAs$,v_d este viteza sa de drift peste barieră, U_b este

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

înălţimea barierei, V_2 este căderea de tensiune pe o vale cuantică. In aproximaţia WKB coeficientul de transmisie prin bariera este dat de expresia

$$T(V_p) = \exp\{-\frac{4L_b}{3q\hbar V_1}(2m_b)^{1/2}[(U_b - qV_2 - E_1)^{3/2} - (U_b - qV_p - E_1)^{3/2}]\}$$

unde m_b este masa efectiva a electronului înbarieră, L_b este grosimea barierei şi $V_p=V_1+V_2$ este căderea de tensiune pe o perioadă a superreţelei. Aşa cum se reprezinta în Fig.6.6 [11] aceste ecuaţii sunt în buna concordanţă cu rezultatele experimentale la tensiuni mici (V_b=0,1V) pe un domeniu de variaţie a curentului cu 5 ordine de mărime. Din concordanţa dintre curbele teoretice si cele experimentale se obţine valoarea vitezei $v_d=2.10^7$cm/s. La tensiuni înalte, adica atunci când căderea de tensiune V_p pe o perioada este mai mare decât $2\hbar/\tau_1$ nu mai este posibil efectul tunel rezonant şi ca rezultat apare o rezistenţă diferenţiala negativă. Atunci când o perioadă a superreţelei nu mai satisface condiţia de rezonanzonaţă, rezistenţa acesteia devine mult mai mare si se formeaza pe ea un domeniu de ckmp intens. Orice creştere de tensiune în continuare se va limita la acest domeniu pâna când primul nivel excitat, adica nivelul E_2 din aceasta vale de potenţial se aliniază (cu o toleranţă de $2\hbar/\tau_2$, unde τ_2 este timpul de viaţă pe satrea excitată) cu nivelul E_1 (fundamental) din valea adiacentă şi astfel este restabilită condiţia de tunelare rezonantă (Fig.6,5c). O creştere în continuare a tensiunii va cauza ca o altă vale cuantică sa întrerupă condiţia de tunelare rezonantă şi sa apară rezistenţă diferenţială negativă (Fig.6.5d), ş.a.m.d. Datorită efectului de ecranare determinat de sarcina spaţială, care apare la tensiuni mari, şi în consecinţă înclinării benzii de energie, formarea domeniilor de câmp intens nu este un proces aleatoriu ci primul domeniu apare lânga anod şi în continuare apare unul câte unul, progresiv, spre catod. In consecinţă, într-un dispozitiv cu n perioade apar n-1 maxime în conductanţa diferenţiala negativă (aşa cum se pune în evidenţă în Fig.6.4). Diferenţa de tensiune dintre două oscilaţii ale conductanţei este

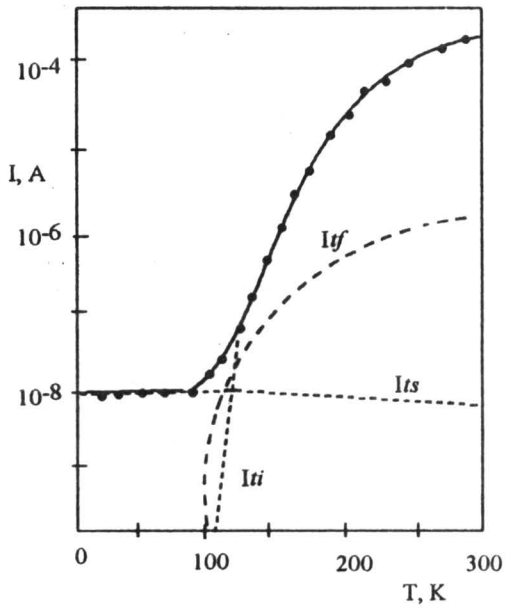


Fig. 6.6.

$$q\Delta V = (E_2 - E_1 - 2\hbar/\tau_1 - 2\hbar/\tau_2) = 85 \pm 18\text{meV}$$

Pentru $2\hbar/\tau_1$=7 meV, obţinută mai sus, şi pentru $2\hbar/\tau_2$=11meV (determinat din spectrul de absorbţie optică) se obţine pentru diferenţa dintre nivelele de energie din valea cuantica de potenţial E_2-E_1=103±18 meV, în bună concordanţă cu valoarea calculată. Din experienţele de absorbţie în infraroşu se obţine E_2-E_1=102±1 meV. Dacă se aplica un câmp mafnetic B paralel cu straturile, maximele rezistenţei negative se deplasează cu valoarea

$$\Delta V = \frac{q < x >^2 B^2}{2m}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Din rezultatele experimentale se obţine pentru elementul de matrice <x> valoarea 11,3 nm în structura considerată. Această valoare este ceva mai mare decât L_b, ceea ce arată că pasul forţei Lorentz este ceva mai mare decât grosimea barierei, datorită extinderii funcţiei de undă a electronilor. Este interesant de notat că la tensiuni şi mai mari, apare încă un set de maxime ale conductanţei negative, 50, care se datorează tunelării succesive în stările din continuu, peste capătul barierei [12].

6.3. *Curentul electric într-un fir cuantic.*

Să considerăm un fir cuantic cu dimensiunile L_x, L_y ~ $\lambda_B << L_z$. Am văzut în paragraful 2.1 că energia electronului într-o subbandă (I, k_z) din firul cuantic, se scrie

$$E_{i,k_z} = E_i + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

unde pentru un fir rectangular infinit

$$E_i \equiv E_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)$$

Densitatea de stări pe unitatea de volum este data de expresia (2.1.22), care pentru o singura subbanda se scrie

$$\rho_{1D} = \frac{(2m)^{1/2}}{\pi\hbar L_x L_y}(E - E_{n_x,n_y})^{-1/2}$$

Concentraţia electronilor în subbanda I=n_x, n_y la T=) K este

$$n = \int_{E_i}^{E_F} \rho_{1D}(E)dE = \frac{2(2m)^{1/2}}{\pi\hbar L_x L_y}(E_F - E_i)^{1/2} \qquad (3.1)$$

Intr-un fir cuantic subbenzile de energie semai numes şi canale. Curentul electric net într-un canal este dat de expresia

$$I_i = L_x L_y n_i q \delta v_z \qquad (3.2)$$

unde $\delta v_z = \hbar\delta k_z / m$ este creşterea vitezei electronului datorită tensiunii aplicate. Menţionam că la echilibru termic, în absenţa unei tensiuni aplicate, nu există curent net deoarece contribuţia unei stări k_z este anulată exact de contribuţia stării $-k_z$. Când între cele două capete ale canalului se aplică o mică diferenţă de potenţial V, potenţialul chimic al stărilor cu $k_z>0$ se află deasupra potenţialului chimic al stărilor cu $k_z<0$ şi astfel apare prin canal un curent electric net. Pentru a deduce valoarea lui δv_z în funcţie de tensiunea aplicată, scriem conservarea energiei

$$qV = \frac{1}{2}m(v_F + \delta v_z)^2 - \frac{1}{2}mv_F^2$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Se obţine

$$qV = mv_F\delta v_z + \frac{1}{2}m\delta v_z^2$$

In cazul $\delta v_z << v_F$, rezultă

$$\delta v_z = \frac{qV}{mv_F} \tag{3.3}$$

Având în vedere relaţia E_F-E_i=$mv_F^2/2$ şi ţinând cont de ec.(3.1) şi (3.3),ec.(3.2) devine

$$I_i = \frac{2q^2V}{h} \tag{3.4}$$

Prin urmare conductanţa canalului

$$G_i = \frac{I_i}{V} = \frac{2q^2}{h} \tag{3.5}$$

este cuantificată. Conductanţa electrică a unui fir cuantic este cuantificată, fiecare canal contribuind cu aceeaşi cantitate, dată de relaţia (3.5), astfel că conductanţa totala este

$$G = \sum_i G_i$$

atunci când nu exisţa împrăştierea electronilor între subbenzi (canale). Relaţia (3.5) a fost dedusă iniţial de către Landauer [13]. Sistemele în care conductanţa electrică la temperaturi joase este cuantificată se numesc sisteme mesoscopice. Acestea au dimensiuni de ordinul zecilor de nm şi pot fi fire metalice, fire cuantice, puncte şi contacte punctuale [14,15]. Relaţia de mai sus a fost dedusă pentru un fir cuantic ideal în care electronul nu suferă împrăştieri pe fononi sau impurităţi, ci numai la frontierele firului. Aceasta se numeşte deplasare balistică a electronului. In realitate un fir cuantic nu este ideal din următoarele cauze: el nu este infinit de lung si deci nu posedă o simetrie perfecta de translaţie; simetria de translaţie este de asemenea întrerupta de catrepotenţialele impurităţilor; în timp ce împrăştierea electronilor pe un număr mic de defecte conduce la efecte de interferenţă reproductibile, care depindde eşantion, cum este cazul fluctuaţiilor conductanţei universale sau localizarea slabă, împrăştierea pe fononi, la o temperatura diferită de zero, este aleatorie în timp si conduce la medierea efectelor de interferenţă. Abaterea de la starea ideală determină diverse tipuri de conducţie,în funcţie de raportu dintre următoarele lungimi caracteristice: L-lungimea firului cuantic sau constricţiei, w-lărgimea sa, l_e-drumul liber mijlociu determinat de împrăştierea elastica pe impurităţi, l_f-drumul liber mediu, determinat de împrăştierea inelastică pe fononi.Se disting următoarele situaţii: (1) Dacă l_f>>l_e>>L, w, electronul nu suferă împrăştieri decât la frontierele firului. Traiectoria elecronului este determinată de îmnprăştierea "speculară" de către pereţii de potenţial ai firului şi are o mişcare perfect balistică, aşa cum se reprezintă în Fig.6.7a. Deplasarea electronului în firul cuantic este similară deplasării unei unde electromagnetice într-un ghid de unde. (2) Dacă l_f>>L>>l_e>>w, există un număr mic de impurităţi în fir. Pe lângă împrăştierea multipla de pereţii firului are loc împrăştierea pe aceste impurităţi şi o parte din electroni pot fi captaţi pe

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

aceste impurităţi şi nu mai participă la procrsul de conducţie. In acest caz probabilitatea de reflexiea electronului depinde de poziţia impurităţilor şi de potenţialul firului, astfel că conductanţa variază abrupt de la un eşantion la altul. Deoarece această variaţie este în mod uzual de ordinul q^2/h, acest regim de funcţionare se numeşte regim de fluctuaţii ale conductanţei universale [16]. Deplasarea electronului în acest caz poate fi numită cuasibalistică (Fig.6.7b). (3) Dacă $l_f >> L >> w >> l_e$, domină împrăştierea multiplă pe impurităţi şi electronii devin localizaţi atât transversal cât si longitudinal cu firul, pe o lungime l_e. Electronii nu mai au comportare unidimensională şi nu exista stări care să se extindă de la un capăt la altul al firului. Electronii sunt slablocalizaţi, se manifesta ca electroni bidimensionali si nu există conductivitate la temperaturi joase.

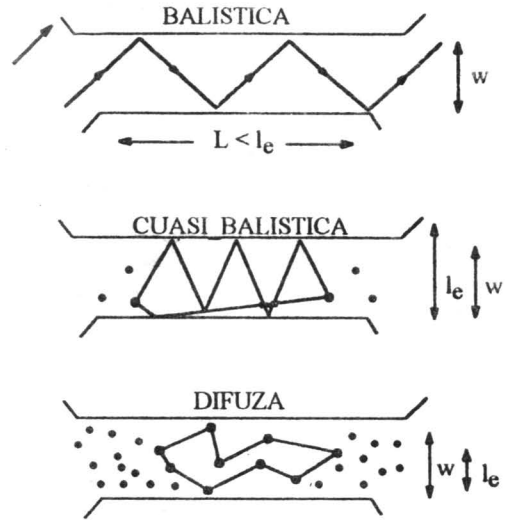


Fig. 6.7

Transportul electronului prin fir este posibil prin împrăştierea pe stări localizate (impurităţi). Aceasta necesită împrăştierea elastică, în care caz gazul de electroni se comportă ca un gaz 2D clasic, ce se supune statisticii Boltzmann, cu $L, w >> l_f >> l_e$. Electronii difuzează prin fir (Fig.6.7c) şi mobilitatea lor este determinată de densitatea medie a impurităţilor. La temperaturi înalte, lungimea de împrăştiere inelastică, l_f, poate deveni mai mică decât lungimea de împrăştiere elastică, l_e, astfel că mobilitatea este determinată de împrăştierea pe fononi. Dependenţa transportului balistic de forma firului cuantic este prezentată în detaliu in [15].

6.4. *Formula lul Landauer.*

Landauer a dedus relaţia dintre conductanţa unui fir unidimensional şi probabilităţile de transmisie T si reflexie R [17]. Să considerăm un fir cuantic mărginit la ambele capete de doua rezervoare de electroni, ideale (Fig.6.8a).Diagrama sa de benzi de energie este reprezentată în Fig.6.8b. Un rezervor ideal satisface următoarele două condiţii: (1) toţi electronii incidenţi sunt absorbiţi de către rezervor, indiferent de energia şi faza lor; (2) el aprovizionează sistemul în mod constant cu electroni cu energia de valoare mai mică decât potenţialul chimic μ. Energia şi faza acestor electroni sunt independente de energia si faza electronilor absorbiţi. Notăm cu μ_1 şi μ_2 potenţialele chimice ale celor două rezervoare 1 şi respectiv, 2 iar cu T şi R notăm probabilităţile de transmisie si, respectiv, de reflexie, ale firului.Conservarea numărului de particule impune condiţia T+R=1. Densitatea de stări de

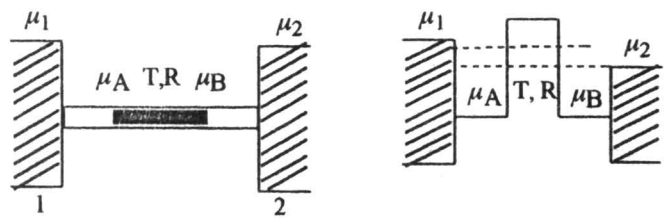


Fig. 6.8

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

energie a electronilor într-un canal (subbandă) din firul cuantic este $\rho(E)=1/\pi\hbar v$ unde v este viteza electronilor. Curentul electric total transportat de către sistem este dat de expresia

$$I=(-q)v\rho(E)T(\mu_1-\mu_2) \tag{4.1}$$

Menţionăm că relaţia este justă şi din punct de vedere dimensional deoarece $\rho(E)=\partial n/\partial E$ unde n este concentraţia electronilor. Deoarece diferenţa de tensiune între terminalele 1 si 2 este corelată cu potenţialele chimice prin relaţaia $-qV_{21}=\mu_1-\mu_2$, conductanţa măsurată între aceste terminale este

$$G=\frac{I}{V_{21}}=\frac{q^2}{\pi\hbar}T \tag{4.2}$$

Această relaţie între conductanţă şi probabilitatea de transmisie este fundamentală pentru înţelegerea fenomenelor de transport în sistemele mesoscopice. μ_1 si μ_2 sunt potenţialele chimice ale rezervoarelor de electroni iar μ_A şi μ_B sunt potenţialele chimice ale celor două conductoare ideale situate de o parte şi de alta a barierei. Cele două conductoare ideale realizează conexiunea între rezervoarele de electroni si sistem. Conductanţa definită de relaţia (4.2) reprezintă conductanţa sistemului atunci când fiecare conductor ideal este în echilibru cu rezervorul la care este conectat şi căderea de tensiune pe sistem (firul cuantic sau bariera) este $-qV=\mu_1-\mu_2$. Dacă nu este îndeplinită această condiţie atunci conductanţa sistemului este definită de relaţia

$$G_s=\frac{I}{(\mu_A-\mu_B)/q}=\frac{q^2}{\pi\hbar}\frac{T}{R} \tag{4.3}$$

deoarece în cazul general este satisfăcută relaţia $-qV=\mu_A-\mu_B=R(\mu_1-\mu_2)$. Se observă că pentru T=0, R=1 şi $\mu_A-\mu_B=\mu_1-\mu_2$ iar pentru T=1 se obţine qV=0. La relaţia (4.3) se poate ajunge şi pe o cale intuitivă:Rezistenţa dintre cele două rezervoare G^{-1}, este egală cu suma dintre rezistenţa firului cuantic (barierei) G_c^{-1} şi rezistenţa contactelor dintre conductoarele ideale şi rezervoarele corespunzătoare. Aceasta din urmă se determină din relaţia (4.2) atunci când T=1 şi este egală cu $\pi\hbar/q^2$. Prin urmare,

$$G^{-1}=G_s^{-1}+\frac{\pi\hbar}{q^2}$$

Din această relaţie si relaţia (4.2) se obţine relaţia (4.3).Pentru un fir cuantic în care conducţia are loc pe mai multe canale se obţine

$$G_s=\frac{2q^2}{\pi\hbar}\frac{\sum_i T_i\sum_i\frac{1}{v_i}}{\sum_i(1+R_i-T_i)/v_i}$$

pentru $T\to 0$, unde v_i este viteza electronului în canalul i iar T_i şi R_i sunt transmisia si, respectiv, reflexia, relative la acest canal.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

6.5. *Focalizarea fascicolului de electroni balistici.*

Un contact punctual sau o constricţie se comportă asemenea unui fir cuantic : conductanţa electrică este cuantificată. Un alt efect important al acestor structuri este acela de filtru pentru electroni: sunt transmişi numai electronii care au energia corespunzătoare modului din canal (adică a subbenzii respective). Această proprietate poate fi utilizată pentru a creia fascicule de electroni monoenergetici, cazul perfect analog unei surse optice punctuale. Dacă în calea acestor electroni se introduce un potenţial cu ajutorul unei porţi de formă concavă (Fig.6.9) are loc focalizarea electronilor la fel ca în optica geometrică [18,19]. Acest potenţial poate fi modificat prin variaţia tensiunii pe poartă. Ca şi în optică refracţia se datorează schimbării direcţiei vectorului de undă atunci când electronul intră într-o regiune cu potenţial diferit de cea din care vine. Legea lui Snell pentru electronii balistici care traversează o frontieră unde viteza lor se modifică poate fi dedusă din ecuaţiile clasice de mişcare. Să considerăm cazul reprezentat în Fig.6.9a unde un electron aflat la energia Fermi F este incident sub unghiul θ_1 pe o interfaţă dintre două regiuni cu concentraţii diferite ale purtătorilor de sarcină $n_1 = mF/\pi\hbar^2; n_2 = m(F-\Phi)/\pi\hbar^2$. Deoarece impulsul paralel cu interfaţa se conservă, $p_1\sin\theta_1 = p_2\sin\theta_2$ (unde p_1 şi p_2 sunt impulsurile electronului în cele două regiuni), din conservarea energiei se obţine

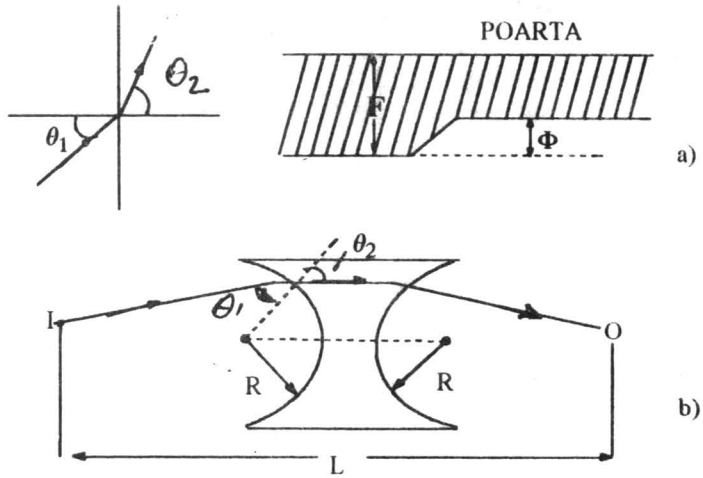


Fig. 6.9

$$\frac{\sin\theta_1}{\sin\theta_2} = \left(1 - \frac{\Phi}{F}\right)^{1/2} \qquad (5.1)$$

care este similară cu legea lui Snell. Notăm că pentru valori pozitive ale lui Φ se obţine θ_2 mai mare decât θ_1, în contrast cu cazul când un foton intră într-un mediu cu constantă dielectrică mai mare. Această deosebire apare deoarece legile de dispersie pentru fotoni sunt diferite de cele pentru particule cu masă de inerţie. In cel de al doilea caz viteza mai mică este acompaniată de lungime de undă mai mare pe când în cazul fotonilor un indice mai mare de refracţie conduce

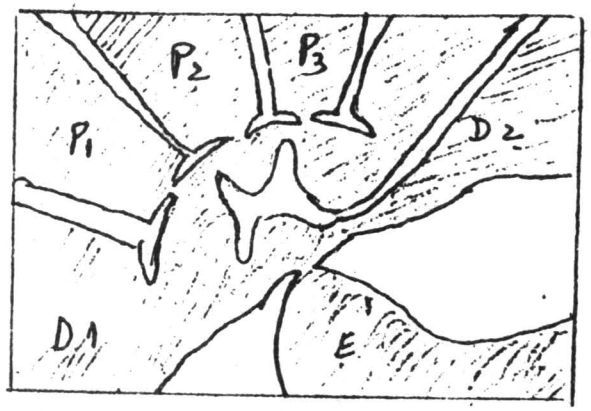


Fig. 6.10

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

la o viteză mai mică si o lungime de undă mai mică. In cele ce urmează vom considera că Φ are valoare pozitivă şi că lentila este de formă concavă. Lentila este construită pe o heterojoncţiune $GaAs/Al_{1-x}Ga_xAs$ Vederea de sus a dispozitivului este reprezentată în Fig.6.10. Zonele nehaşurate reprezintă porţile metalizate. Două porţi metalizate limitează între ele un emitor punctual (E) iar alte patru porţi metalice aranjate de-a lungul circumferinţei unui cerc definesc trei sonde de tensiune (P_1,P_2,P_3) situate la unghiurile -30°, 0, 30° faţă de axa emitorului. Dimensiunile deschiderilor emitorului şi sondelor sunt între 180 nm şi 500 nm iar raza dispozitivului este în mod uzual de 2,2 μm. In centrul structurii este situată o poartă metalică de formă biconcavă care este poarta lentilei cu feţele circulare cu razele egale cu R=400 nm şi cu lăţimea la mijloc w=400 nm. Pe porţile emitorului E,pe cele trei sonde P_1,P_2,P_3 şi cele două contacte de drenă D_1,D_2 au fost realizate contacte ohmice din aliajul Ni/Ge/Au. Aplicarea unor tensiuni negative suficient de mari pe porţile emitorului şi sondelor creiază bariere de potenţial mai înalte decât F (energia Fermi), sub aceste porţi, care confinează electronii către regiunile fără porţi şi regiunea lentilei. Aplicarea unei tensiuni negative mici pe poarta lentilei formează o barieră de potenţial puţin adâncă, sub poartă, cu forma spaţială la fel cu cea a lentilei. Energia potenţială Φ formată sub poarta lentilei depinde de tensiunea V_{GL} aplicată pe poarta lentilei şi poate fi modificată de la valoarea zero până la o valoare mai mare decât F, astfel că raportul $\sin\theta_2/\sin\theta_1$ poate fi modificat între valoarea unitate şi infinit, modificând distanţa de focalizare între raza lentilei si infinit. Distanţa L dintre un obiect O şi imaginea sa I, presupunând că lentila este echidistantă între O şi I, (Fig.6.9b), se poate calcula utilizând relaţia (5.1). Pentru valori mici ale lui θ_1 şi θ_2 ea este dată de expresia

$$L = \frac{2R}{1-(1-\Phi/F)^{1/2}} + w \qquad (5.2)$$

Pentru L=2,2 μm rezultă condiţia de obţinere a imaginii la această distanţă $\Phi=2F/3$ =6,7 meV, pentru valoarea energiei Fermi în material F=10,7 meV. Experimental, se trece un curent între emitor si drenă la tensiune constantă şi se măsoară tensiunea obţinută între diverse sonde {P_1,P_2,P_3), luate câte două,în funcţie de V_{GL}. Fascicolul de electroni injectat prin constricţia emitorului E este parţial colimat chiar pentru V_{GL}=0 ceea ce face ca transmisia T_{EP1} de la emitor la poarta P_1, să fie diferită de transmisia T_{EP2}, de la emitor la poarta P_2. Colimarea fascicolului creşte cu creşterea tensiunii V_{GL} aplicată pe poarta lentilei şi deci creşte diferenţa T_{EP2}-T_{EP1} (efectul de focalizare). Notăm cu V_{P1} tensiunea măsurată pe poarta P_1 (între aceasta şi drenă) şi cu V_{P2} tensiunea măsurata pe poarta P_2 (între aceasta si poartă) si cu $V_{21}=V_{P2}-V_{P1}$. Este satisfăcuta relaţia

$$V_{21} = V_E \frac{T_{EP2} - T_{EP1}}{T_{P2P1}}$$

unde V_E este tensiunea aplicată pe emitor. V_{21} are valoarea maximă atunci când este satisfăcută relaţia de focalizare (5.2) şi T_{EP2}-T_{EP1} atinge valoarea maximă. Această valoare se atinge la V_{GL}= -0,37 V. Cu creşterea tensiunii V_{GL} peste această valoare are loc o scădere aproape bruscă a lui V_{21}. Prin urmare, focalizarea dată de către lentilă este pusă în evidenţă prin măsurarea lui V_{21} în funcţie de V_{GL}, care prezintă un maxim atunci când este satisfăcută relaţia (5.2).

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

6.6. *Efectul Hall în câmp magnetic slab. Interferometrul Fabry-Perot.*

În mod uzual coeficienţii de transport într-un fir cuantic se măsoară utilizând fire cuantice încrucişate. La transmisia balistică prin joncţiunea dintre două fire cuantice încrucişate s-au observat fenomene interesante. Dintre acestea vom discuta două:anomalia efectului Hall în câmp magnetic slab şi interferometrul electronic în câmp magnetic slab. Ne referim întâi la primul efect. Dependenţa rezistenţei Hall de câmpul magnetic în câmp magnetic slab este reprezentată în Fig.6.11.Se observă că la valori mici ale câmpului magnetic rezistenţa Hall este zero (nu apare efect Hall), apoi are o creştere rapidă ca după

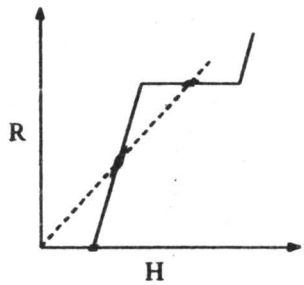


Fig. 6.11

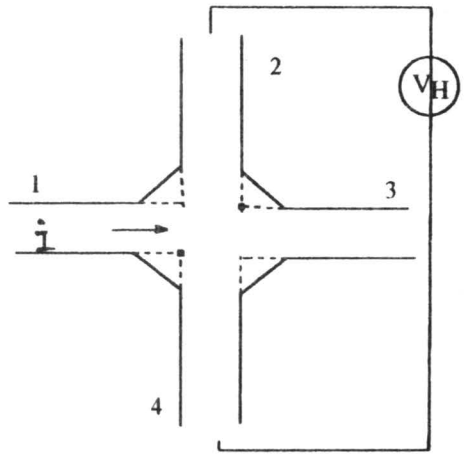


Fig. 6.12

aceea să prezinte un platou şi iarăsi o creştere. Pe figură, cu linie întreruptă, este reprezentată rezistenţa Hall clasică, r_H=H/qn. Aceste anomalii apar datorită razei de curbură mari a colţului joncţiunii. Joncţiunea a două fire cuantice utilizată pentru măsurarea efectului Hall este reprezentată în Fig.6.12. Pentru a deduce expresia rezistenţei Hall scriem formula lui Landauer pentru un sistem cu mai multe terminale

$$I_i = \frac{q^2}{\pi\hbar}[(1-R_{ii})\mu_i - \sum_{j\neq i} T_{ij}\mu_j] \qquad (6.1)$$

unde I_i este curentul care trece prin terminala i a sistemului care are potenţialul chimic μ_i, T_{ij} este probabilitatea de transmisie de la terminala i la terminala j şi R_{ii} este probabilitatea de reflexie de la i la i . Condiţia de conservare a fluxului se scrie

$$R_{ii} + \sum_{j\neq i} T_{ij} = 1 \qquad (4.2)$$

pentru orice I. Teorema de reciprocitate a lui Onsager se scrie

$$R_{ii}(H)=R_{ii}(-H);\ T_{ij}(H)=T_{ji}(-H) \qquad (6.3)$$

unde H ste intensitatea câmpului magnetic.In scopul de a obţine rezistenţa Hall în câmp magnetic slab considerăm în joncţiunea din Fig.6.12

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$I_1=-I_3=I,\ I_2=I_4=0,\ V_{24}=V_H \tag{6.4}$$

și

$$T_{31}=T_{13}=T,\ T_{24}=T_{42}=T'$$

$$T_{21}=T_{32}=\text{“}=T''(1+\beta H),\ T_{12}=T_{23}=\text{“}=T''(1-\beta H)$$

Rezistenţa Hall se calculează din expresia

$$R_H=\frac{V_H}{I_H}=\frac{h}{2q^2}\frac{\beta HT''}{(T+T'')(T'+T'')} \tag{6.5}$$

Efectul Hall se poate anula în următoarele două cazuri: (1) $\beta H<<1$ şi (2) $T''<<1$. Pentru joncţiunile ale căror colţuri sunt abrupte (nu sunt rotunde) calculul arată că $T\sim T'\sim T''$ şi $R_H\sim(h/2q^2)\beta H\sim H/nq$. In acest caz nu are loc anularea efectului Hall decât dacă există împrăştiere puternică pe neregularităţile frontierelor. Cei mai mulţi electroni sunt împrăştiaţi de mai multe ori de frontierele joncţiunii înainte de a fi transmişi între cele două sonde de tensiune. Efectul câmpului magnetic asupra acestor electroni cu o asemenea traiectorie complicată este cu totul diferit atunci când colţurile joncţiunii sunt rotunde faţă de cazul când acestea sunt abrupte, ceea ce determină anularea efectului Hall în câmp magnetic slab si chiar schimbarea de semn. La câmp magnetic mai mare, când raza ciclotronică devine comparabilă cu lărgimea firului, cei mai mulţi electroni sunt transmişi la sonda de tensiune din stânga şi apare o saturaţie a efectului Hall (platou).Calcule numerice recente,bazate pe mecanica cuantică, au arătat că pentru o joncţiune cu colţurile rotunde, $T\sim T'\sim T''$ şi prin urmare originea anulării efectului Hall trebuie sa se găsească din condiţia $\beta H<<1$ [20].

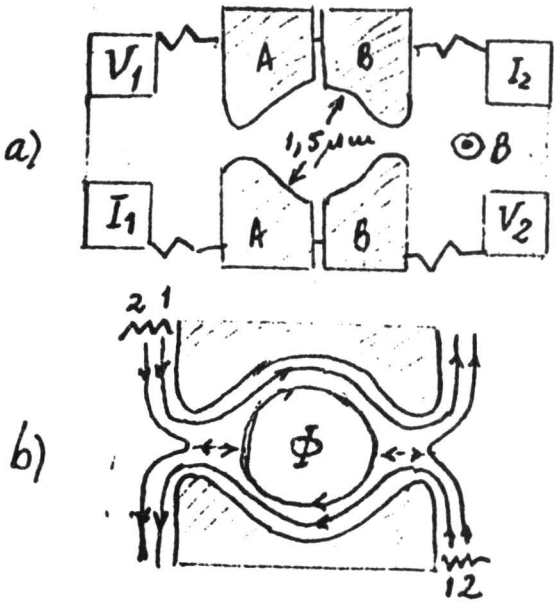


Fig. 6.13

In Fig.6.13 se prezintă o regiune închisă între două constricţii [21]. Dacă se aplică un câmp magnetic slab,regiunea închisă acţionează ca un punct cuantic cuplat slab la regiunea din exterior prin intermediul constricţiilor. Aşa cum se reprezintă în Fig.6.13a structura conţine patru contacte punctuale,la două se conectează tensiunea aplicată iar prin celelalte două se măsoară curentul electric. Starea de energie a punctului cuantic depinde de tensiunea aplicată pe constricţie şi de valoarea câmpului magnetic. Structura este analogul unidimensional al unei structuri cu barieră dublă sau al uni interferometru Fabry-Perot.Atunci când satrea de energie a punctului cuantic este la rezonanţă cu energiile Fermi din contactele externe,a pare o transmisie rezonantă. Transmisia într-o asemenea structura este dată de relaţia Fabry-Perot

$$T=T_AT_B\frac{1}{1-2\sqrt{R_AR_B}\cos\theta+R_AR_B} \tag{6.6}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde T_A,T_B și R_{AAAAA}, R_B sunt coeficienţii de transmisie si de reflexie la contactele punctuale. q este faza funcţiei de undă asociată electronului. La aplicarea unei tensiuni negative (-0,2 V) pe fiecare pereche de porţi (perechea de porţi A și perechea de porţi B), determină deflexia electronilor din regiunile de sub aceste porţi. In funcţie de valoarea acestei tensiuni aplicate, constricţiile pot permite sau nu intrarea sau ieșirea electronilor prin cele două constricţii. Evident, că se poate aplica tensiune numai pe o pereche de porţi. In câmp magnetic intens, energia electronului este dată de expresia [22]

$$E = F - (n - \frac{1}{2})\hbar\omega_c \mp \frac{1}{2} g\mu_B H \qquad (6.7)$$

Pentru o valoare dată a lui n (numărul lui Landau) corespunde o subbandă de energie sau un canal. Electronii,cu diferite valori ale lui n și orientări ale spinului,se deplasează pe linii echipotenţiale V(x,y) diferite, care satisfac condiţia E=-qV(x,y). In Fig.6.13b se reprezintă deplasarea electronilor pentru cazul când sunt ocupate două nivele Landau (deplasate între ele datorită despicării de spin). In acest exemplu potenţialul punctului cuantic are o astfel de valoare încât electronii din primul canal sunt transmiși complet, iar cei din al doilea canal sunt numai parţial transmiși. Acest al doilea canal formează un interferometru unidimensional. Conductanţa sistemului este egală cu suma dintre conductanţa canalelor care transmit complet și conductanţa interferometrului unidimensional [23]

$$G = \frac{q^2}{h}(N + T) \qquad (6.8)$$

unde N este numărul de canale care transmit complet și T este dat de relaţia (6.6). Relaţia dintre faza q și aria S închisă de către canalul de cea mai mare energie ocupat cu electroni este $\theta=2\pi(BS)/\Phi_o$ unde $\Phi_o=h/q$ este cuanta de flux. Dacă T_A și T_B sunt egale cu zero, se formează stări de energie discrete zerodimensionale pentru care θ este egal cu un multiplu întreg de 2π. La aceste energii,un canal de cea mai mare energie ocupată cu electroni cuprinde un număr întreg de cuante de flux [24]. S-a măsurat atât conductanţa punctelor cuantice individuale G_A și G_B cât și conductanţa G a întregului sistem în funcţie de câmpul magnetic B. Rezultatele obţinute sunt reprezentate în Fig.6.14. Conductanţa unui punct cuantic individual se măsoară aplicând tensiune negativă pe perechea de porţi corespunzătoare (de exemplu A) iar cealaltă pereche de porţi (B) este menţinută la tensiune zero. Conductanţa totală se măsoară aplicând tensiune negativă pe ambele perechi de porţi. Tensiunea pe porţi s-a fixat la valoarea de -0,35V. Creșterea câmpului magnetic are două

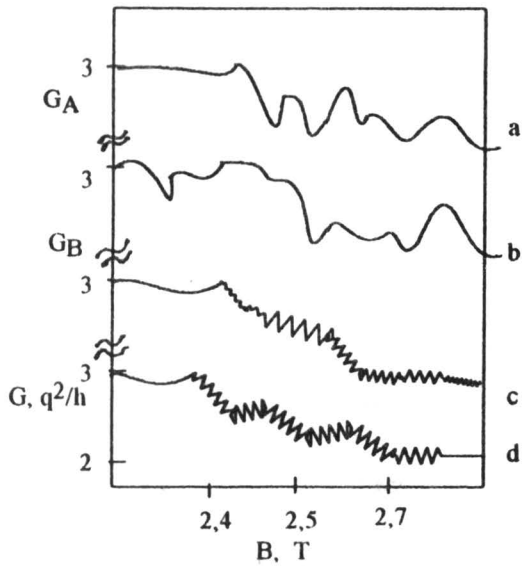


Fig. 6.14

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

efecte. Intâi, numărul de canale prin care se transmit electronii se micşorează gradat. Conductanţa unui canal individual, G_A, G_B, prezintă platouri cuantificate în acele intervale ale câmpului magnetic B cuprinse între valoarea când ultimul canal ocupat cu electroni transmite complet şi valoarea lui B când acesta reflectă complet (T_A,T_B=0).Al doilea efect al câmpului magnetic este modificarea fazei θ. Ecuaţia (6.8) arata că G este cuantificată când atât G_A cât şi G_B sunt cuantificate, unde

$$G_{A,B} = \frac{q^2}{h}(N + T_{A,B})$$

şi apar oscilaţii, când G_A şi G_B nu sunt cuantificate, a căror maxime au loc ori de câte ori energia stării zerodimensionale coincide cu energia Fermi (atunci când cosθ=1). In Fig.6.14a şi 6.14b se prezintă conductanţele individuale şi se ilustrează tranziţia de la platoul $3q^2/h$ la platoul $2q^2/h$. Conductanţa totală a dispozitivului obţinută experimental este reprezentată în Fig.6.14c iar în Fig.6.14d este reprezentată conductanţa calculată dupa relaţia (6.8).Perioada oscilaţiilor variaza de la 2,5 mT la 2,8 mT deoarece variază aria închisă de orbita electronului, de la un canal la altul. Cu creşterea câmpului magnetic se micşorează numărul de canale ocupate cu electroni si deci orbita electronuui ultimului canal ocupat cu electroni se modifică.

6.7. *Efectul unui singur electron. Blocarea Coulomb.*

O joncţiune cu dimensiunea mai mică decât 100 nm are capacitatea mai mică decât 10^{-15}F. In consecinţă energia de încărcare asociată sarcinii unui singur electron $E_c=q^2/2C$ devine semnificativa la temperaturti mai mici decât 1K unde energia termică este mult mai mică decât E_c. Să considerăm o joncţiune tunel între doi electrozi metalici, cu capacitatea C. Tunelarea electronului între cei doi electrozi metalici este acompaniată de transferul unei sarcini q şi de o variaţie de energie ΔE

$$\Delta E = \frac{(Q-q)^2}{2C} - \frac{Q^2}{2C} = \frac{q(q-2Q)}{2C}$$

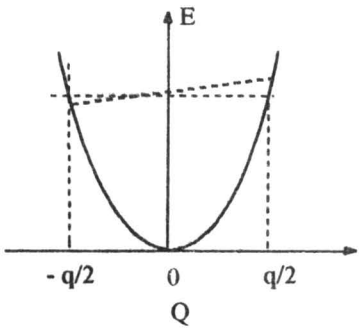


Fig. 6.15

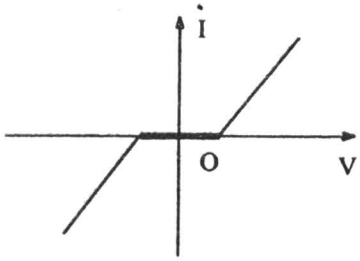


Fig. 6.16

unde Q este sarcina acumulată pe joncţiune înainte de tunelare. Astfel, aşa cum se reprezintă în Fig.6.15 tunelarea este interzisă pentru $|Q| < q/2$ ceea ce conduce la o caracteristică I-V aşa cum se reprezintă în fig.6.16 [25]. Există o blocare a curentului electric până la o anumită valoare a tensiunii V, numită blocare Coulomb. Utilizând mai multe asemenea joncţiuni metalice mici conectate în serie se pot obtine tranzistori cu un singur electron [26]. De

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

asemenea, prin conectarea în serie a unor constricţii înguste din heterostructuri GaAs/AlGaAs se obţine o structură a cărei conductanţă are oscilaţii cuasiperiodice, datorita efectului de încărcare (blocare) Coulomb [27].

6.8. *Cuantificarea energiei electronului în câmp magnetic.*

Considerăm un câmp magnetic de inducţie B aplicat în direcţia x care este direcţia grosimii stratului subţire care constituie valea cuantică sau direcţia de creştere a superreţelei (adică direcţia normală pe interfeţe). Potenţialul vector **A** are componentele **A**(0,0,By), astfel că Hamiltonianul sistemului in câmp magnetic

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + q\mathbf{A})^2 + U(x)$$

se reduce la

$$H = \frac{1}{2m}p_y^2 + \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2m}(p_z - qBy)^2 + U(x)$$

Componenta Hamiltonianului după x rămâne aceeaşi ca şi în absenţa câmpului magnetic şi soluţiile sale generează subbenzile E_{nx}. Partea din Hamiltonian din planul (yz) se reduce la ecuaţia oscilatorului armonic cu centrul de coordonate deplasat cu valoarea $|y_o| = \hbar k_z / qB$. Pentru a găsi valorile proprii ale energiei se introduce în Hamiltonian $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ şi se obţine ecuaţia Schrodinger sub forma

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\Psi + \left(\frac{\partial}{\partial z} + i\frac{qBy}{\hbar}\right)^2\Psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0 \qquad (8.1)$$

Am eliminat

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| < L_x \\ \infty, & |x| > L_x \end{cases}$$

întrucât nu afectează rezultatele în cele ce urmează. Considerând o funcţie de undă de forma $\Psi = e^{ik_z z}F(x)u(y)$ ecuaţia Schrodinger devine

$$u''(y) + \left[\left(\frac{2mE_t}{\hbar^2} - \left(k_z + \frac{qBy}{\hbar}\right)^2\right]u(y) = 0$$

unde $E_t = E - E_{nx}$. Utilizând substituţiile $y_o = -\hbar k_z / qB$ şi $\omega_c = qB/m$ se obţine ecuaţia

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(y) + \frac{m}{2}\omega_c^2(y - y_o)^2 = E_t u(y)$$

ω_c se numeşte frecvenţa ciclotonică. Aceasta este ecuaţia lui Schrodinger a oscilatorului armonic care oscilează cu frecvenţa ω_c în jurul punctului y_o. Valorile proprii ale energiei sunt

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$E_{L,N}=(N+1/2)\hbar\omega_c$ unde N=0,1,2, "Se obţine că energia mişcării electronului în planul k_y, k_z (perpendicular pe câmpul magnetic) se cuantifică in N nivele Landau. Energia totală se scrie

$$E=(N+\frac{1}{2})\frac{q\hbar B}{m}+E_{nx} \qquad (8.2)$$

Efectele cuantificării energiei pot fi puse în evidenţă numai în cazul în care distanţa dintre nivelurile de energie depăşeşte valoarea k_BT, adică $\hbar qB/m > k_{BT}$; se obţine $B>(m/m_o)T$ unde m_o este masa electronului liber, B se exprimă în Tesla iar T în K. La temperatura heliului lichid (T=4,2K) pentru $m/m_o=0,1$ se obţine $B>0,42$ Wb/m^2. Câmpul magnetic nua are nici o influenţă asupra mişcării după direcţia câmpului (care este direcţia x). In planul yoz, în cazul gazului de electroni tridimensional, electronul efectuează o mişcare circulară cu frecvenţa ciclotronică ω_c. Energia datorată acestei mişcări este cuantificată, discretă, intervalele dintre valorile permise ale energiei sunt egale cu $\hbar\omega_c$. Caracterul discret al energiei mişcării de rotaţie deosebeşte comportarea cuantica de cea clasică, pentru care energia mişcării de rotatie este continuă. Prin urmare, pentru mişcarea clasică sunt posibile orice raze ale cercului în timp ce pentru mişcarea cuantică razele orbitelor sunt cuantificate, fiind egale cu

$$r_N=\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_c}(N+\frac{1}{2})}$$

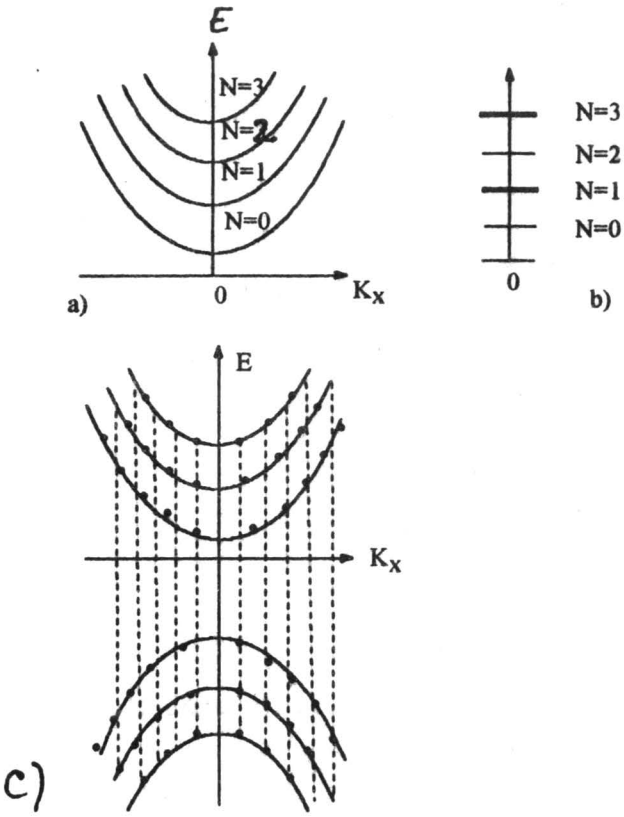


Fig. 6.17

Pentru trecerea electronului de pe o orbită pe alta este necesar să se cheltuiască energia $\hbar\omega_c\delta N$ unde δN este un număr întreg. Procesele de absorbţie a energiei datorită variaţiei mişcării de rotaţie trebuie să se caracterizeze printr-un spectru discret de linii; acest fenomen se numeşte rezonanţă ciclotronică. Spectrul energetic $E_N(k_x)$ al electronilor poate fi reprezentat printr-o familie de parabole pătratice, deplasate una faţă de alta după axa energiei cu mărimea $\hbar\omega_c$ (Fig. 6.17a). Spectrul energetic $E_N(k_x=0)$ se reprezinta printr-o mulţime de nivele discrete (Fig.6.17b). Diagrama nivelelor de energie reprezentată în Fig.6.17a reprezintă gazul de electroni tridimensional, adică atunci când nu este cuantificată energia după k_x. In cazul gazului de electroni bidimensional, $k_x=(\pi/d)n$, adică există cuantificare după k_x, spectrul de energie $E(k_x)$ apare

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

ca un număr de puncte separate ,aranjate de-a lungul benzii Landau corespunzatoare, aşa cum se reprezintă in Fig.6.17c. In cele ce urmează vom prezenta densitatea de stări de energie.

Ne ocupăm întâi de gazul de electroni tridimensional, adică in expresia energiei E dată de relaţia (8.2) avem $E_{nx}=\hbar^2k_x^2/2m$ care nu este cuantificată. Considerăm gazul electronic conţinut în volumul $\Omega=L_1L_2L_3$, definit prin condiţiile de frontieră $-L_1/2\le x\le L_1/2$; $-L_2/2\le y\le L_2/2$; $-L_3/2\le z\le L_3/2$. Impunem soluţiei ecuaţiei lui Schrodinger următoarele condiţii de periodicitate

$$\Psi_{k_x,k_z,N}(x,y,z)=\Psi_{k_x,k_z,N}(x+L_1,y,z+L_3)$$

care rezultă din forma funcţiei de undă $\Psi=e^{i(k_xx+k_zz)}u(y)$ adică sunt satisfăcute relaţiile $k_x=(2\pi/L_1)n_1$, $k_z=(2\pi/L_3)n_3$ unde n_1 si n_3 sunt numere întregi. Pe axa y nu poate fi impusă această condiţie de ciclicitate deoarece funcţia proprie a oscilatorului armonic

$$u(y-y_o)=\frac{1}{\sqrt{\Lambda}}e^{-\frac{1}{2}(\frac{y-y_o}{\Lambda})^2}H_N(\frac{y-y_o}{\Lambda});\qquad H_N(\xi)=\frac{(-1)^N}{\sqrt{2^N N!\sqrt{\pi}}}e^{\xi^2}\frac{d^Ne^{-\xi^2}}{d\xi^N}$$

nu prezintă proprietate de periodicitate fiind definită de-a lungul întregii axe y. Aceasta abatere de la condiţia fizică corectă de frontieră care este $\Psi=0$ pe suprafaţa paralelipipedului considerat nu este esenţială atâta timp cât razele cercurilor corespunzătoare nivelurilor Landau sunt mici în comparaţie cu dimensiunile liniare ale volumului care conţine gazul electronic. In ecuaţia de mai sus $H_N((y-y_o)/\Lambda)$, (unde $\Lambda^2=\hbar/qB$), este polinomul Hermite de ordinul N. Valorile proprii ale energiei date de relaţia (8.2) nu depind de k_z , ceea ce arată ca există a priori mai multe stări pentru fiecare valoare proprie,câte valori are k_z. Cu alte cuvinte există dgenerare a energiei după k_z. Această multiplicitate a degenerării se obţine împărţind domeniul de valori ale lui k_z la $2\pi/L_3$ (care reprezintă volumul ocupat de o stare k_z). Având în vedere relaţia $y_0=-\hbar k_z/qB$ şi ca centrul oscilatorului trebuie să fie situat în domeniul $-L_2/2\le|y_0|\le L_2/2$ rezultă

$$(k_z)_{max}=\frac{qBL_2}{2\hbar};\qquad (k_z)_{min}=-\frac{qBL_2}{2\hbar}$$

Se obţine multiplicitatea degenerării

$$\frac{(k_z)_{max}-(k_z)_{min}}{2\pi/L_3}=\frac{L_2L_3qB}{2\pi\hbar}\qquad(8.3)$$

Acum nu mai are sens să vorbim despre suprafeţe izoenergetice dintr-o zonă Brillouin deoarece E nu depinde de k_y si k_z. Numărul stărilor (după k_x) din intervalul dk_x pentru valori ale lui N şi ω_c date este

$$dS=\frac{dk_x}{2\pi/L_1}=\frac{L_1}{2\pi}dk_x$$

Legătura dintre dk_x si dE se găseste utilizând relaţia (8.2)

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$k_x = (\frac{2m}{\hbar^2})^{1/2}[E - \hbar\omega_c(N + \frac{1}{2})]^{1/2}; \qquad dk_x = \frac{1}{2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2}[E - \hbar\omega_c(N + \frac{1}{2})]^{-1/2}dE$$

Rezultă

$$dS = \frac{L_1}{2\pi}dk_x = \frac{L_1}{4\pi}(\frac{2m}{\hbar^2})^{1/2}[E - \hbar\omega_c(N + \frac{1}{2})]^{-1/2}dE \qquad (8.4)$$

Densitatea stărior cuantice ale electronilor în câmp magnetic va fi egală cu produsul dintre densitatea stărilor energetice după k_x (8.4) și multiplicitatea degenerării după k_z (8.3)

$$g_N(E)dE = \frac{L_2 L_e qB}{2\pi\hbar}\frac{L_1}{4\pi}(\frac{2m}{\hbar^2})^{1/2}[E - \hbar\omega_c(N + \frac{1}{2})]^{-1/2}dE$$

Densitatea totală de stări se găsește insumând această expresie pe toate nivelele Landau

$$g(E) = \sum_N g_N(E) = \frac{\hbar\omega_c}{2}[2\pi(\frac{2m}{\hbar^2})^{3/2}]\sum_{N=0}^{v}[E - \hbar\omega_c(N + \frac{1}{2})]^{-1/2} \qquad (8.5)$$

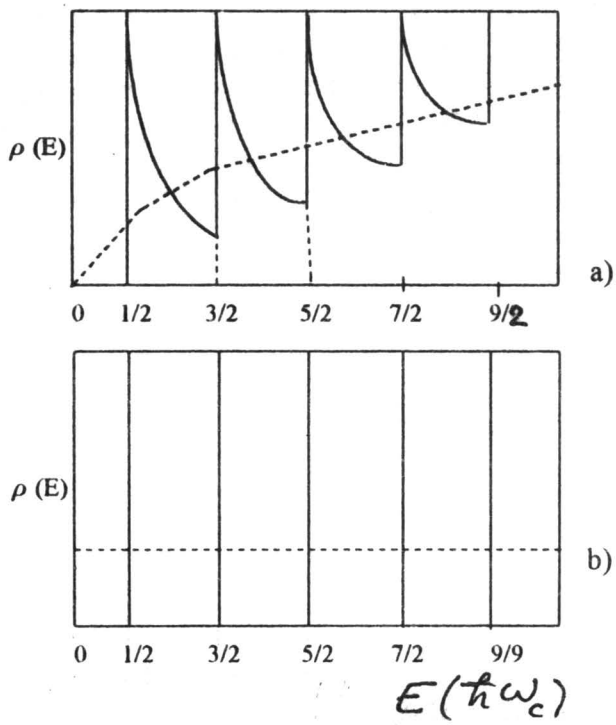


Fig. 6.18

această densitate este raportată la unitatea de volum a cristalului. S-a mai adăugat un factor 2 pentru a lua în considerare cele două semne posibile ale lui k_x când acesta se obține din relatia (8.2). Să examinăm unul din termenii sumei (8.5). Deoarece N este fixat, atunci pentru $E > \hbar\omega_c(N + 1/2)$, densitatea de stări este mică si se comportă ca $1/\sqrt{E}$. Deoarece mărimea $g_N(E)$ trebuie să fie reală, rezultă că $g_N(E)$ este definită numai pentru o energie $E > \hbar\omega_c(N + 1/2)$. Pentru $E \to \hbar\omega_c(N + 1/2)$, $g_N(E) \to \infty$. In Fig.6.18a este reprezentată densitatea de stări in câmp magnetic, cu linie continuă, iar cu linie întreruptă este reprezentată densitatea de stări în absența câmpului magnetic. Densitatea totală g(E) reprezintă suma a N hiperbole identice, deplasate în raport cu axa energiei cu un număr întreg $\hbar\omega_c$. In punctele $E = \hbar\omega_c(N + 1/2)$ densitatea de stări devine infinită. Ea are caracter de funcție δ cu un număr finit de stări. $g_N(E)$ conține într-adevăr pentru orice interval finit de energie $\{\hbar\omega_c(N + 1/2), E_0\}$ un număr finit de stări

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$\int_{\hbar\omega_c(N+1/2)}^{E_o} g_N(E)dE = \frac{\hbar\omega_c}{2}[2\pi(\frac{2m}{\hbar^2})^{3/2}] \int_{\hbar\omega_c(N+1/2)}^{E_o}[E-\hbar\omega_c(N+1/2)]^{-1/2}dE =$$

$$\hbar\omega_c[2\pi(\frac{2m}{\hbar^2})^{3/2}][E_o-\hbar\omega_c(N+1/2)]^{1/2}$$

Prin urmare, orice interval energetic finit $\{\hbar\omega_c(N+1/2),\hbar\omega_c(N+1/2)+\Delta E\}$ conţine un număr finit de stări

$$\hbar\omega_c[2\pi(\frac{2m}{\hbar^2})^{3/2}](\Delta E)^{1/2}$$

Cu cât este mai mare valoarea lui E cu atât este mai mare N şi cu atât mai mare va fi g(E) pentru valorile lui E în intervalul dintre punctele singulare. Aşa cum se observă în Fig.6.18a odată cu creşterea lui E mărimea g(E) la stânga fiecărui punct singular se află cu atât mai sus cu cât N este mai mare.

In continuare prezentăm densitatea de stări a gazului electronic bidimensional în câmp magnetic. In acest caz este cuantificată şi energia E_{nx}.Efectuând identificarea

$$\frac{\hbar^2k_t^2}{2m} = (N+\frac{1}{2})\frac{q\hbar B}{m}$$

se obţine valoarea lui $k_t^2 \equiv k_y^2+k_z^2$, astfel ca aria suprafeţei de energie în spaţiul vectorului de undă paralel cu stratul este $A=\pi k_t^2 = (2\pi q/\hbar)B(N+1/2)$ şi este deci cuantificată. Suprafaţa unei stări în spaţiul k bidimensional este $(2\pi)^2/S$ unde S este secţiunea unui strat pe care pentru simplitate o luăm egală cu unitatea. Numărul total de stări se obţine împărţind elementul de arie $\Delta A = (2\pi q/\hbar)B$ prin aria unei stări. Dacă se ia în considerare şi degenerarea de spin, atunci numărul de stări corespunzătoare unui nivel Landau ,care se numeşte factor de degenerescenţă şi se notează cu ξ, este dat de expresia

$$\xi = \frac{2}{(2\pi)^2}\frac{2\pi qB}{\hbar} = \frac{qB}{\pi\hbar} \qquad (8.6)$$

Se observă că are aceeaşi valoare cu multiplicitatea degenerării (8.3) dacă aceasta din urmă se înmulţeşte cu factorul 2, prin luarea în considerare a degenerării de spin şi de asemenea dacă se raportează la unitatea de arie a stratului considerat. De fapt am regăsit acelaşi rezultat pe altă cale. In cazul gazului de electroni bidimensional densitatea de stări este $r=m/\pi\hbar^2$ şi degenerescenţa este egală cu produsul dintre r şi $\hbar\omega_c$, ceea ce arată că fiecare nivel Landau generat de către câmp colectează stările din spectrul continuu dintr-un interval de energie egal cu $\hbar\omega_c$. Densitatea de stări în prezenţa câmpului magnetic în cazul bidimensional este reprezentată în Fig.6.18b. Cu linie întreruptă este reprezentat cazul bidimensional corespunzător absenţei câmpului magnetic. Energia minimă de referinţă este E_1. Se observă că spre deosebire de cazul tridimensional densitatea de stări are aceeaşi valoare pentru fiecare nivel Landau.Notăm că dacă se consideră în mod explicit efectul de spin, la energia totală (8.2) se adaugă termenul $\pm(1/2)g\mu_B B$ unde g este factorul despin Zeeman şi μ_B este magnetonul Bohr, egal cu $q\hbar/2m$. In acest caz factorul de degenerescenţă este de două ori mai mic, adică qB/h (nu se mai înmulţeşte în (8.6) cu 2, datorită ridicării degenerării

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

de spin).Degenerescenţa ξ a unui nivel înmulţită cu numărul N al nivelurilor ocupate, este egală cu densitatea de electroni bidimensionali

$$\frac{qB}{h}N = n_s \tag{8.7}$$

Cum n_s este o mărime constantă pentru un eşantion dat se observă din (8.7) că cu cât B este mai intens, cu atât N este mai mic. Când B creşte,la anumite valori ale lui B, N descreşte cu o unitate. Astfel, cu variaţia lui B, pentru anumite valori ale lui B energia Fermi coincide cu un nivel Landau si magnetorezistenţa structurii cuantice prezintă oscilaţii cu B. Acestea se numesc oscilaţii Shubnikov-de Haas. Oscilaţiile apar la intervale egale în 1/B

$$\Delta(\frac{1}{B}) = \frac{q}{hn_s}\Delta N \tag{8.8}$$

Din măsurarea acestei perioade se determină densitatea purtătorilor de sarcină n_s sau energia Fermi dacă se cunoaşte valoarea masei efective.

6.9. *Efectul Hall cuantic.*

Considerăm o structură în care curentul electric circulă în direcţia z şi căreia i se aplică un câmp magnetic intens în direcţia x. In cazul tridimensional tensiunea Hall U_y, în direcţia y, este dată de expresia

$$U_y = \frac{1}{nq}\frac{I_z B}{d}$$

unde am inclus semnul minus în q;d este dimensiunea eşantionului după directia x ,I_z este intensitatea curentului aplicat după direcţia z ,n este concentraţia electronilor tridimensionali. In cazul gazului de electroni bidimensional, densitatea de electroni pe unitatea de arie a stratului este n_s=nd unde d≡L_1 este grosimea stratului. In aceste condiţii din relaţia de mai sus se obţine

$$\rho_{yz} = \frac{B}{qn_s} \tag{9.1}$$

La temperaturi joase si câmpuri magnetice intense nu se observă o relatie liniară între ρ_{yz} şi B ci,aşa cum se reprezintă în Fig.6.19, pe anumite domenii de valori ale câmpului magnetic, unde magnetorezistenţa ρ_{zz} devine neglijabilă, rezistivitatea Hall prezintă platouri. Rezultatele prezentate au fost obţinute pentru un eşantion di $GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ cu densitatea electronilor egala cu $4{,}2.10^{11}cm^{-2}$ şi mobilitatea egală cu $7{,}9.10^4 cm^2/V.s$ [28]. Din relaţiile (8.7) şi (9.1) se obtine pentru rezistivitatea Hall relaţia

$$\rho_{yz} = \frac{h}{q^2 N} \tag{9.2}$$

unde N este numărul de nivele Landau ocupate cu electroni. ρ_{yz} depinde numai de constantele fundamentale care sunt corelate cu constanta structurii fine $\alpha = (q^2/\hbar)\,.\,\mu_o c/2 \approx 1/137$, unde μ_o este permeabilitatea vidului şi c este viteza luminii. Se poate scrie [29]

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$\rho_{yz} = \frac{\mu_o c}{2\alpha N} = \frac{25812,807}{N}, \Omega \qquad (9.3)$$

Pe platourile din Fig.6.19, rezistivitatea Hall este dată de această expresie.Din măsurarea rezistivităţii Hall se poate determina constanta structurii fine cu o precizie de 10^{-6}. Valoarea rezistivităţii Hall corespunzătoare primului platou (N=1) s-a introdus din anul 1990 ca standard de rezistenţă [30] şi serveşte pentru calibrarea corectă a rezistenţelor. Ea are valoarea R_{K-90}=25812,807 Ω. Apariţia platourilor în ρ_{yz} se explică pe baza existenţei unor niveluri localizate (care nu participă la cuantificare), datorate impurităţilor sau unor fenomene de dezordine,situate în intervalul dintre două niveluri Landau. Când nivelul Fermi se situează în intervalul dintre două niveluri Landau, aceste niveluri localizate contribuie la transportul întregului curent Hall, care-şi menţine valoarea constantă până când cu creşterea lui B nivelul Fermi se intersectează cu următorul nivel Landau si apare un nou salt în rezistivitate. Experienţe ulterioare [31] efectuate pe eşantioane din $GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ cu mobilitate mai mare a electronilor, $\mu=9.10^4 cm^2/V.s$ şi densitatea electronilor $n_s=1,23.10^{11} cm^{-2}$, la temperaturi mai joase şi la câmpuri mai intense au pus în evidenţă efectul Hall cuantic fracţionar la N=1/3 si 2/3. A fost pus de asemenea în evidenţă efectul Hall fracţionar la N=2/5,3/5 şi 4/5 [32]. In cazul N fracţionar, acesta reprezintă gradul de ocupare a nivelului Landau cel mai de jos [33]. In acest caz sistemul de electroni se găseşte la limita cuantică extremă, când este ocupat nivelul Landau cel mai de jos.Intr-un model teoretic se presupune ca în acest caz gazul de electroni bidimensional se comportă ca un fluid cuantic incompresibil,o nouă stare a materiei. Excitaţiile elementare ale stărilor fundamentale ale acestui fluid cuantic au sarcină fracţionară începând cu 1/3, trecând prin alte valori fracţionare cu numitor impar şi terminând eventual cu o stare cristalină. S-a obţinut efectul Hall fracţionar şi pentru N>1 şi N>2.

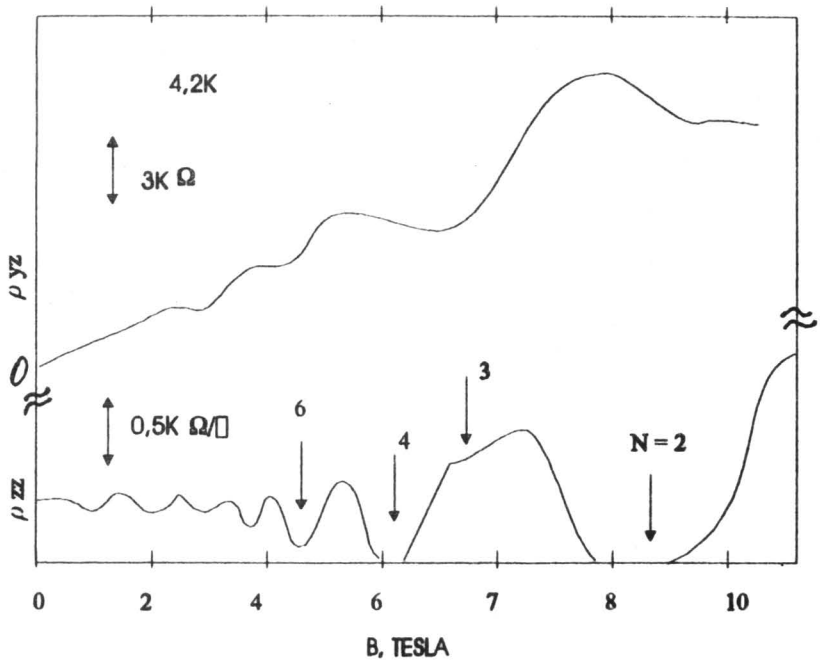


Fig. 6.19

6.10. *Magnetorezistenţa.*

Tensorul magnetoconductivităţii $\sigma_{ij}(\mathbf{B})$ se defineşte prin expresia

$$J_i=\sigma_{ij}F_j \; ; \qquad i,j=x,y,z \qquad (10.1)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde J_i este densitatea de curent şi F_j este intensitatea câmpului electric. Dacă se consideră intensitatea câmnpului magnetic B orientată după direcţia x şi în ecuaţiile

$$J_y=\sigma_{yy}F_y+\sigma_{yz}F_z$$
$$J_z=\sigma_{zy}F_y+s_{zz}F_z \qquad (10.2)$$

obţinute din (10.1), se consideră $J_y=0$, care corespunde condiţiei Hall, si deci există transport de curent numai în direcţia z, rezultă pentru magnetorezistenţa în direcţia z expresia

$$\rho_{zz}=\frac{F_z}{J_z}=\frac{\sigma_{zz}}{\sigma_{zz}^2+\sigma_{yz}^2} \qquad (10.3)$$

unde în câmp magnetic intens σ_{yz} este uzual mult mai mare decât σ_{zz}. Prin urmare, în acest caz magnetorezistenţa definita în direcţia z este data de expresia

$$\rho_{zz}\approx\sigma_{zz}\rho_{yz}^2$$

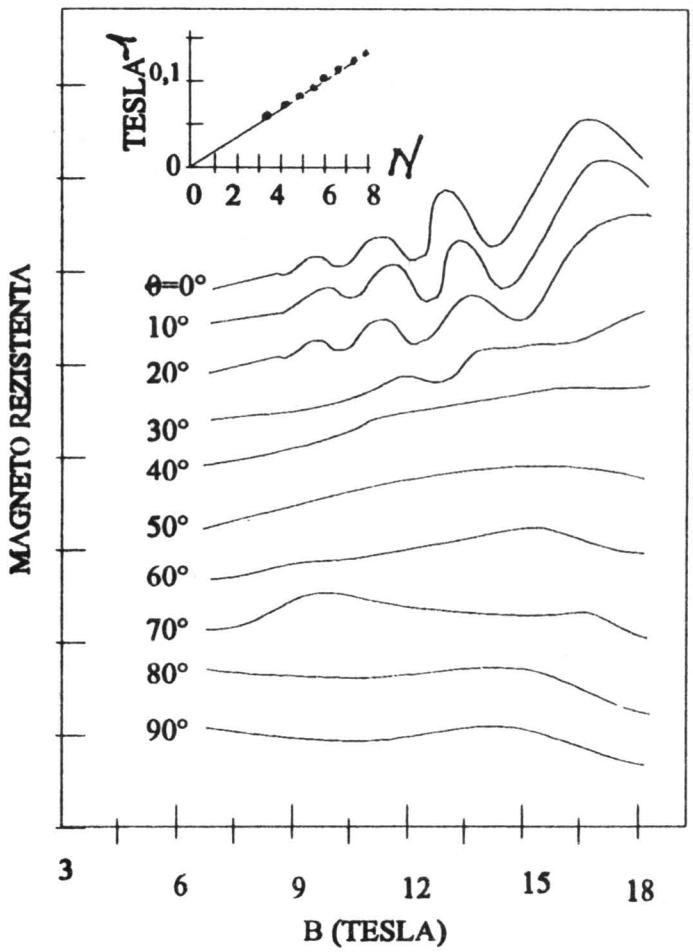


Fig. 6.20

unde ρ_{yz} este rezistivitatea Hall dată de expresia (9.2). Din relaţia (8.7) se obţine că cu cât B este mai intens cu atât N este mai mic. Deoarece împrăştierea electronilor atinge un maxim atunci când nivelul Fermi E_F coincide cu un nivel Landau, magnetorezistenţa oscilează cu B. Acestea se numesc oscilaţii Shubnikov-de Haas. Perioada oscilaţiilor funcţiei 1/B în funcţie de indicele Landau N este q/hn_s (ec.8.8). Atunci când un nivel Landau coincide cu nivelul E_F este satisfăcută relaţia

$$(N+\frac{1}{2})\frac{q\hbar B}{m}=E_F$$

de unde se poate scrie

$$\frac{\Delta(1/B)}{\Delta N}=\frac{q\hbar}{mE_F}=\frac{q}{hn_s}$$

Oscilaţiile agnetorezistenţei apar la intervale egale în 1/B. In Fig.6.20 este reprezentată magnetorezistenţa transversală la 4,2K într-o superreţea $GaAs/Al_{0,11}Ga_{0,89}As$ cu densitatea electronilor egală cu $1,2.10^{18}cm^{-3}$ şi perioada superreţelei 18 nm (a=b=9 nm). Se observă oscilaţii Shubnikov-de Haas. In insert este reprezentat inversul câmpului magnetic la care au loc maximele în functie de numărul N al nivelelor Landau ocupate cu electroni, pentru un câmp magnetic perpendicular, adică orientat în direcţia x perpendiculară pe straturi. Curbele

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

magnetorezistenţei sunt trasate pentru diverse valori ale unghiului θ dintre câmpul magnetic si normala la suprafaţa superreţelei. In acest caz în relaţiile de mai sus B se înlocuieşte cu B_x=Bcosθ. La θ=0 câmpul este perpendicular pe suprafaţă iar la θ=90° câmpul este paralel cu suprafaţa probei. Cu creşterea lui θ maximul oscilaţiior se deplasează către câmpuri mai intense. Dependenţa unghiulară de cosθ evidenţiază caracterul bidimensional al gazului electronic. In Fig.6.21 sunt reprezentate suprafeţele Fermi pentru GaAs masiv (stânga),pentru o superreţea GaAs(4 nm)/$Ga_{0,85}Al_{0,15}As$(3 nm) (mijloc) şi pentru o superreţea GaAs(9 nm)/ $Ga_{0,83}Al_{0,17}As$(7,5 nm) (dreapta). Proiecţia suprafeţei Fermi a GaAs masiv în planul yoz este un cerc, gazul de electroni este tridimensional şi perioada oscilaţiilor 1/B a magnetorezistenţei nu depinde deci de orientarea câmpului magnetic. In cazul gazului bidimensional suprafaţa Fermi este un cilindru si proiecţia in planul yoz este un dreptunghi (Fig.6.21 stânga). In acest caz perioada oscilaţiilot 1/B depinde de θ. In Fig.6.21, partea de jos, se reprezintă dependenţa perioadei oscilaţiilor de θ pentru cele trei cazuri. Din dependenţa perioadei oscilaţiilor de unghiul θ se pot trage concluzii dacă gazul de electroni este bidimensional sau tridimensional.

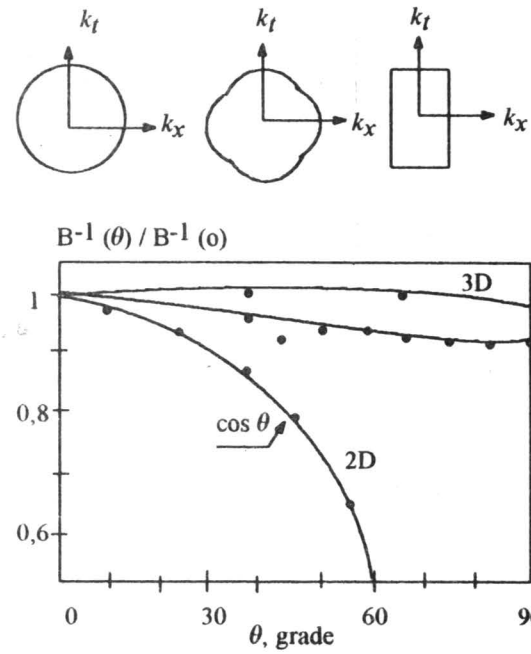


Fig. 6.21

6.11. *Cuantificarea energiei în câmp magnetic în cazul văii cuantice de formă parabolică.*

In cazul văii cuantice de formă parabolică spectrul de energie si funcţiile de undă pot fi exprimate analitic in cazul unei orientări arbitrare a câmpului magnetic [34].Pentru $V(z)=az^2$ (deci în acest caz grosimea văii cuantice este orientată în direcţia axei z) se poate introduce potenţialul vector de forma $A_y=xB_z-zB_x$,$A_x=A_z=0$ şi ecuaţia Schrodinger ia forma

$$\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})+\frac{1}{2m}[-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}+q(xB_z-zB_x)]^2+az^2-E\}\Psi=0 \qquad (11.1)$$

Soluţia ecuaţiei poate fi scrisă

$$\Psi(x,y,z)=e^{ik_y y}f(x,z) \qquad (11.2)$$

Introducem notaţia $x_1=x-x_o$ unde $x_o=\hbar k_y / qB_z$. In ec.(11.1) se pot elimina termenii liniari în x_1 şi z precum şi termenul care conţine k_y^2 si ecuaţia pentru f(y,z) capătă forma

$$\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})+\frac{m}{2}[\omega_z^2x_1^2+(\omega_x^2+\omega_o^2)z^2+2\omega_x\omega_z x_1 z]-E\}f=0 \qquad (11.3)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde $\omega_z=qB_z/m$, $\omega_x=qB_x/m$, $\omega_o^2=2a/m$. Efectuând schimbarea de variabile

$$x_1\xi\cos\phi+\eta\sin\phi;\quad z=-\xi\sin\phi+\eta\cos\phi$$

unde

$$\tan 2\varphi=\frac{2\omega_x\omega_z}{\omega_z^2-\omega_x^2-\omega_o^2}$$

ecuaţia (11.3) se transformă într-o ecuaţie care conţine numai termeni pătratici în ξ şi η şi funcţia de undă poate fi scrisă sub forma unui produs $f(\xi,\eta)=f_1(\xi)f_2(\eta)$ unde f_1 si f_2 sunt fiecare soluţie a unei ecuaţii de forma ecuaţiei oscilatorului (paragraful 6.8) cu $y_o=0$ şi $\Lambda_{1,2}^2=\hbar/m\omega_{1,2}$ unde

$$\omega_{1,2}=\{\frac{1}{2}(\omega_c^2+\omega_o^2)\pm\frac{1}{2}[(\omega_c^4+\omega_o^4)-2\omega_o^2(\omega_x^2-\omega_z^2)]^{1/2}\}^{1/2}$$
$$\omega_c^2=\omega_x^2+\omega_z^2 \qquad (11.4)$$

iar energia

$$E=\hbar\omega_1(N_1+\frac{1}{2})+\hbar\omega_2(N_2+\frac{1}{2}) \qquad (11.5)$$

Pentru $B_z=0$ avem $\omega_1=\omega_z,\omega_2=\omega_o$, adică frecvenţa unuia din oscilaatori nu depinde de B. Pentru $B_z\to0,\omega_2\to0,\omega_1=(\omega_o^2+\omega_x^2)^{1/2}$. Totuşi pentru $B_z\to0$, $x_o=\hbar k_y/qB_z\to\infty$ şi ec.(11.3) nu mai este valabilă. In acest caz soluţia ec.(11.3) se poate lua sub forma $\Psi=\exp[i(k_xx+k_yy)\chi(z)$. Introducând noua variabilă $z_1=z-z_o$, unde $z_o=(\hbar k_y/m)\omega_c/(\omega_c^2+\omega_o^2)$, obţinem o ecuaţie a oscilatorului armonic a cărei soluţie este funcţia prezentată în paragraful 6.8 cu $y_o=0$, $\Lambda=(\hbar/m\omega_1)^{1/2}$, $\omega_c=qB_x/m$. Energia totală poate fi scrisă

$$E=\hbar\omega_1(N+\frac{1}{2})+\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2\frac{\omega_o^2}{\omega_o^2-\omega_c^2}) \qquad (11.6)$$

Se poate pune întrebarea la ce valoare a lui B_z(11.5) se transformă în (11.6). Condiţia de valabilitate a relaţiilor obtinute mai sus este $\omega_{1,2}\tau>>1$ unde τ este timpul de relaxare a impulsului electronului. Evident, $\omega_2>>1/\tau$ pentru $\omega_z\tau>>(1+\omega_c^2/\omega_o^2)^{1/2}$. Densitatea de stări de energie g(E) calculată din (11.5), (11.6) coincide pentru $\omega_z\to0$ şi este egală cu

$$g(E)=\frac{m}{\pi\hbar^2}(1+\frac{\omega_c^2}{\omega_o^2})^{1/2}$$

Relaţiile de mai sus sunt valabile în câmp magnetic slab (totuşi suficient pentru a se obtine cuantificarea) când diferenţa dintre nivelurile Landau este mică în comparaţie cu lărgimea minibenzii.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

6.12. *Tranzistorul cu efect de câmp cu dopare modulată.*

Tranzistorul cu efect de câmp cu dopare modulată (MODTEC) pe bază de $Ga_{1-x}Al_xAs$ cu lungimea canalului de 3 μm și a porții de 1 μm are o transconductanță de 400 mS/mm și 275 mS/mm la 77K si, respectiv, 300K, o amplificare de 10 dB la 10 GHz și timpul de comutare de 12 ps și 17 ps la 77K și respectiv, 300K [33]. El constă dintr-o structură cu o singură interfață, în care electronii sunt separați de donori. Interfața este o heterojoncțiune $Al_{1-x}Ga_xAs/GaAs$ în care se dopează cu donori stratul $Al_{1-x}Ga_xAs$ și pentru a se obține performanțe si mai bune se lasă nedopată o regiune din acest strat situată în imediata vecinătate cu stratul de GaAs. Electronii de pe donori trec în stratul de GaAs și sarcina spațială formată dă naștere unui câmp electric intern la interfață (mai mare decât 10^6V/cm) care determină apariția unei văi de potențial triunghiulară (Fig. 6.22). Datorită existenței unei discontinuități între benzile de conducție ale celor două materiale electronii sunt confinați în valea de potențial și sunt separați spațial de donori. Valea de potențial fiind suficient de subțire, stările de energie a electronilor se cuantifică. Cuantificarea are loc pe direcție perpendiculară pe heterostructură iar mișcarea paralelă cu interfața este liberă. Deoarece au numai două grade de libertate disponibile, purtătorii de sarcină din fiecare stare cuantică formează un sistem bidimensional. Abaterea de la bidimensionalitate apare numai prin împrăștierea între stările cuantice sau prin tunelarea între diferite straturi. După cum s-a menționat în paragraful 2.16 mobilitatea purtătorilor de sarcină crește cu concentrația acestora. In tranzistorul cu efect de câmp cu dopare modulată creșterea concentrației electronilor, controlul acesteia, se face se face cu ajutorul unei tensiuni aplicate pe poartă (care este construită din aluminiu) care formează cu semiconductorul o diodă Schottky. Valea de potențial constituie canalul tranzistorului. O vedere în secțiune a unui MODTEC este reprezentata în Fig.6.23. Lungimea porții este de 1 μm iar distanța sursă-drenă (lungimea canalului) este egală cu 3 μm. Lărgimea porții este de 145 μm. Grosimea stratului suport (din GaAs) este de 6 nm,

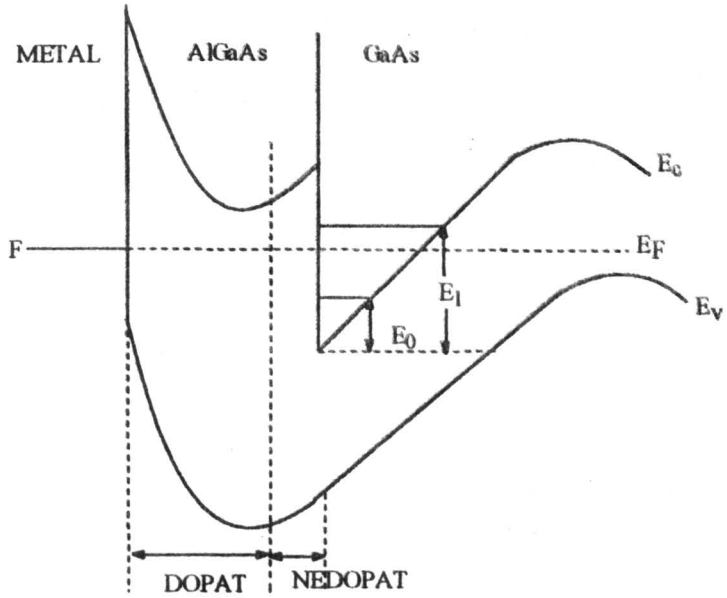


Fig. 6.22

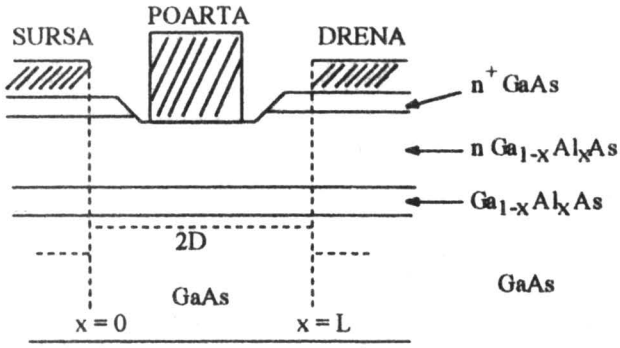


Fig. 6.23

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

grosimea stratului nedopat din $Al_xGa_{1-x}As$ este de 6 nm, grosimea stratului $Al_xGa_{1-x}As$ de tip n este de 60 nm, x=0,3, concentraţia impurităţilor donoare $N_D=10^{18}$ cm^{-3}. Pentru a corela concentraţia purtătorilor liberi din stratul de la interfaţă cu nivelele de energie presupunem că valea de potenţial de la interfaţă este triunghiulară şi câmpul electric F este aproximativ constant.energia cuantificata este dată de relaţia

$$E_n = (\frac{\hbar^2}{2m})^{1/3}(\frac{3}{2}\pi qF)^{2/3}(n+\frac{3}{4})^{2/3}; \qquad n = 0,1,2,..$$

Energiile primelor două subbenzi sunt date de expresiile

$$E_o=1,83.10^{-6}F^{2/3}\ ;\ E_1=3,23.10^{-6}F^{2/3}$$

unde F se exprimă in V/m. In continuare utilizăm ecuatia Poisson în stratul de GaAs

$$\frac{dF_1}{dx} = -\frac{q}{\varepsilon_1}n(x)$$

unde n(x) şi ε_1 sunt concentraţia electronilor şi,respectiv,permitivitatea în materialul cu bandă interzisă îngustă (GaAs). Integrând pe suprafaţa de deflexie rezultă $\varepsilon_1F_1=qn_s$ unde F_1 este câmpul electric şi n_s este concentraţia electronilor la interfaţă.Din ecuaţiile de mai sus se obţine $E_o=\lambda_o(n_s)^{2/3}$, $E_1=\lambda_1(n_s)^{2/3}$ unde λ_o,λ_1 sunt parametri ajustabili pentru a se obţine concordanţă bună cu experienţa. Din măsurarea oscilaţiilor Shubnikov-de Haas sau rezonanţă ciclotron s-au estimat valorile $\lambda_o=2,5.10^{-12}Jm^{3/4}$, $\lambda_1=3,2.10^{-12}Jm^{4/3}$. Pentru a stabili relaţia între n_s şi qV_1 unde V_1 este potenţialul la interfaţă în GaAs , utilizăm relaţia

$$n_s = g_o\int_{E_o}^{E_1}\frac{dE}{1+\exp(\frac{E-qV_1}{kT})} + 2g_o\int_{E_1}^{\infty}\frac{dE}{1+\exp(\frac{E-qV_1}{kT})}$$

unde $$g_o = \frac{m}{\pi\hbar^2}$$

este densitatea de stări asociată cu un nivel cuantic de energie si este exprimată în eV^{-1} m^{-2}. Am utilizat funcţia de distribuţie Fermi-Dirac şi am luat în considerare degenerarea de spin. Având in vedere că

$$\int\frac{dx}{1+e^x} = -\ln(1+e^{-x})$$

se obţine

$$n_s = g_o kT\ln[(1+\exp(\frac{qV_1-E_o}{kT}))(1+\exp(\frac{qV_1-E_1}{kT}))] \qquad (12.1)$$

Aşa cum se reprezintă în Fig.6.24 qV_1 este diferenţa dintre energia Fermi (luată ca referinţă) şi marginea inferioară a benzii de conducţie în GaAs la interfaţă. Prin urmare,în relaţiile de mai sus se poate substitui qV_1 cu E_f^o. La temperaturi foarte joase relaţia (12.1) se reduce la

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$n_s=g_o(E_F^o-E_o)$ atunci când este ocupată numai prima subbandă și la $n_s=g_o(E_F^o-E_o)+g_o(E_F^o-E_1)$ când este ocupată si a doua subbandă. Din măsurarea masei efective în experienţe de rezonanţă ciclotronică s-a estimat $g_o=3{,}24.10^{17}m^{-2}eV^{-1}$. Concentraţia purtătorilor liberi de la interfaţă, pe care am calculat-o mai sus provine de pe stările donoare din semiconductorul cu banda interzisa largă $Ga_{1-x}Al_xAs$. La echilibru, sarcina deflectată din $Al_xGa_{1-x}As$ este egală cu sarcina acumulata în GaAs si nivelul Fermi este unic în heterostructură. Deoarece nivelul de dopare în $Al_xGa_{1-x}As$ este destul de mare,nu se poate utiliza aproximatia deflexiei complete de electroni în stratul de sarcină spaţială. Chiar dacă concentratia impurităţilor de dopare este constantă sarcina va fi funcţie de distanţă $\rho(x)=q[N_D^+(x)-n(x)]$ unde n(x) este concentratia electronilor liberi și

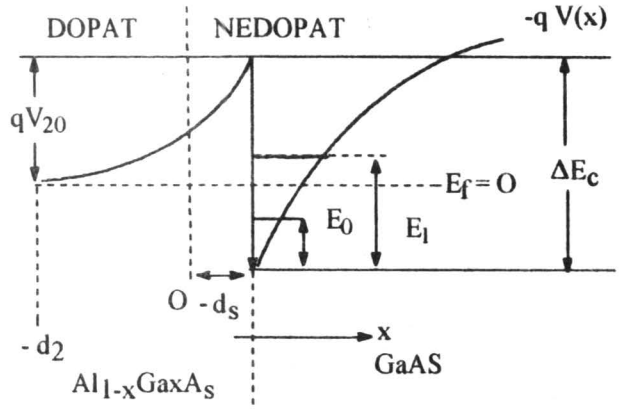


Fig. 6.24

$$N_D^+(x)=\frac{N_D}{1+\beta\exp[(E_D+qV)/kT]}$$

este concentraţia donorilor ionizaţi, N_D este concentraţia donorilor, E_D este energia lor de activare și β este factorul de degenerare a nivelului donor. Concentraţia electronilor liberi în $Al_xGa_{1-x}As$ este dată de expresia

$$n(x)=N_c\frac{\exp(qV/kT)}{1+\exp(qV/kT)/4}$$

unde N_c este densitatea de stări din banda de conducţie a $Al_xGa_{1-x}As$ si nivelul Fermi este luat ca origine a energiei ($E_F=0$). Scriem ecuaţia Poisson

$$\frac{d^2V}{dx^2}=-\frac{\rho(x)}{\varepsilon_2}$$

unde V este potenţialul electrostatic și x este distanţa în direcţie perpendiculară pe interfaţă. Având în vedere relaţiile de mai sus rezultă

$$\frac{d^2V}{dx^2}=-\frac{qN_c}{\varepsilon_2}\left(\frac{N_D'}{1+\beta'\exp(qV/kT)}-\frac{\exp(qV/kT)}{1+\exp(qV/kT)/4}\right)$$

$$\beta'=\beta\exp(E_D/kT);\quad N_D'=N_D/N_c$$

Integrând aceasta relaţie de la $V(-d_2)$ la $V(0)$ și utilizând condiţia de frontieră $F(-d_2)=0$ se obţine

$$F_2^2(0)=\frac{2kTN_c}{\varepsilon_2}\left[N_D'\ln\frac{\beta'+\exp\{-qV(0)/kT\}}{\beta'+\exp\{-qV(-d_2)/kT\}}+4\ln\frac{4+\exp\{qV(0)/kT\}}{4+\exp\{qV(-d_2)/kT\}}\right.\quad(12.2)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde d_2 este frontiera regiunii de deflexie și F_2 este câmpul electric din regiunea $Al_x Ga_{1-x}As$. Pentru a găsi constanta $V(-d_2)$ utilizam condiția de neutraliutate la $x=-d_2$, adică

$$\rho(-d_2)=\frac{-qN_c}{\varepsilon_2}\left(\frac{N'_D}{1+\beta'\exp(\frac{qV(-d_2)}{kT})}-\frac{\exp(\frac{qV(-d_2)}{kT})}{1+\exp(\frac{qV(-d_2)}{kT})/4}\right)=0$$

soluția acestei ecuații este

$$\eta=\exp[-qV(-d_2)/kT]=\frac{-(1-\frac{N'_D}{4})+\sqrt{(1-\frac{N'_D}{4})^2+4\beta' N'_D}}{2\beta'}$$

Din Fig.6.24 se observă că $qV(-d_2)$ este egal cu diferența dintre nivelul Fermi și marginea benzii de conductie la $x= -d_2$. Utilizând inegalitatea $\exp(-qV(0)/kT)>>1$ relația (12.2) se simplifică și devine

$$F_2^2(0)=\frac{2qN_D}{\varepsilon_2}[-V(0)+V(-d_2)-\frac{kT}{q}[\ln(1+\beta'\eta]+\frac{4}{N'_D}\ln(1+\frac{\eta}{4})] \qquad (12.3)$$

Utilizând legea lui Gauss se găsește densitatea de sarcină de la interfață

$$qn_s=Q_{so}=\varepsilon_2 F_2(0)=\varepsilon_2 F_2(d^-_s)$$

Având în vedere (12.3) se obține

$$n_s=\sqrt{\frac{2\varepsilon_2 N_D}{q}[-V(d_s^-)+V(-d_2)+\delta]+N_D^2 d_s^2}-N_D d_s \qquad (12.4)$$

unde $$\delta=-\frac{kT}{q}\{\ln(1+\beta'\eta)+\frac{4}{N'_D}\ln(1-\frac{\eta}{4})\}$$

Pentru deducerea relației (12.4) s-a utilizat relația $V(0)-F_2(0)d_s=V(d^-_s)$,unde $V(d^-_s)$ este valoarea potențialului la interfață în regiunea $Al_xGa_{1-x}As$. Inclinarea totală a benzii in $Al_xGa_{1-x}As$ este $-V(d_s)+V(-d_2)$. Se observă că în relația de mai sus, obținută prin calcul exact (adică s-a luat în considerare și n(x) în ecuația Poisson) se scade din deflexia totală valoarea δ. Pentru a calcula valoarea concentrației electronilor la interfață, n_s, se utilizează relațiile (12.4),(12.1) precum și relația

$$V(d_s^+)=\frac{\Delta E_c}{2}+V(d_s^-)$$

Coordonata $x=d_s^+$ corespunde regiunii GaAs iar coordonata d_s^- corespunde regiunii $Al_xGa_{1-x}As$. Calculul se efectuează numeric, iar pentru nivelele de energie E_o si E_1 se introduc expresiile lor în funcție de n_s scrise la începutul acestui paragraf. Valorile lui n_s obținute la interfață utilizând simultan cele două expresii trebuie să coincidă, având posibilitatea să se

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

ajusteze corect parametrii heterostructurii. In aproximaţia **deflexiei totale ,în ec.(12.4)** se ia d=0, astfel că

$$qn_s = \varepsilon_2 F_2(0) = \sqrt{2q\varepsilon_2 N_D[-V(d_s^-) + V(-d_2)] + q^2 N_D^2 d_s^2} - qN_D d_s \qquad (12.5)$$

In continuare vom deduce relaţiile dintre tensiunea aplicată pe poartă şi valoarea lui n_s precum şi relaţia curent-tensiune în MODTEC. Diagrama de benzi de energie a structurii cu tensiune negativă aplicată pe dioda Schottky (care joacă rol de poartă) este reprezentată în Fig.6.25. Se observă că în $Al_xGa_{1-x}As$ există două regiuni de deflexie,una determinată de interfaţă şi alta determinată de bariera Schottky. Dacă stratul dopat de $Al_xGa_{1-x}As$, de grosime d,este suficient de subţire şi se aplică tensiune mare pe poartă se poate presupune ca există deflexie totală în aceasta regiune şi este aplicabilă relaţia (12.5). Potenţialul electrostatic in această regiune este (Fig.6.25)

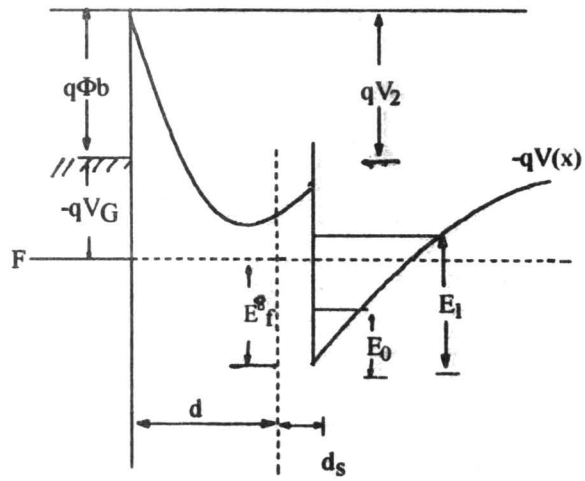


Fig. 6.25

$$V_2 = V_o - F_2(0)(d + d_s)$$

$$V(0) = qN_D d^2 / 2\varepsilon_2$$

In regiunea d_s, care este nedopată, câmpul electric este constant. **Există de asemenea relaţiile**

$$\varepsilon_2 F_2(d_s^-) = \varepsilon_2 F_2(0) = qn_s = \frac{\varepsilon_2}{d}(V_o - V_2)$$

Având în vedere notaţiile din fig.6.25 se poate scrie

$$V_2 = \Phi_b - V_G + \frac{1}{q}(E_F^o - \Delta E_c)$$

Din ultimele două relaţii rezultă

$$n_s = \frac{\varepsilon_2}{q(d + d_s)}[V_G - (\Phi_b - V_o + \frac{1}{q}E_F^o - \frac{1}{q}\Delta E_c)] \qquad (12.6)$$

Pentru valori mari ale lui n_s din ec.(12.1) se obţine

$$-\frac{1}{q}E_F^o = \frac{1}{q}\Delta E_F(T) + an_s \qquad (12.7)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde $a=0,125.10^{-16}Vm^2$ si $\Delta E_F=0$ la 300K si este egala cu 25 meV la 77K şi mai jos. Substituind (12.7) în (12.6) rezultă

$$n_s = \frac{\varepsilon_2}{q(d+d_s+\Delta d)}(V_G - V_P)$$

unde tensiunea de prag este dată de expresia

$$V_P = \Phi_b - \frac{1}{q}\Delta E_c - V_o + \frac{1}{q}\Delta E_F$$

şi $\Delta d=\varepsilon_2 a/q\approx 8$ nm. Relaţia dintre sarcină si tensiunea aplicată este

$$Q_s = qn_s = \frac{\varepsilon_2}{d+d_s+\Delta d}(V_G - V_P) \qquad (12.8)$$

Pentru $d+d_s=30$ nm valoarea $\Delta d=8$ nm reprezintă o corecţie importantă.Această corecţie se datorează dependenţei lui E_F° de V_G prin n_s.In continuare vom prezenta relaţia curent-tensiune în tranzistor. Se aplică pe poartă tensiunea V_G şi pe drenă tensiunea V_D. Notăm cu R_s şi R_d rezistenţele (parazite) ale sursei şi drenei. Notăm tensiunea pe canal cu $V_c(x)$. La x=0, Fig.6.24, avem $V_c(0)=R_sI$ unde I este curentul care trece prin canal. La x=L, unde L este lungimea canalului,avem $V_{DI}=V_C(x=L)=V_D-(R_D+R_S)I$. La distanţa x de sursă tensiunea efectivă este dată de relaţia $V_{ef}=V_G-V_c(x)$ şi utilizând relaţia (12.8)

$$Q_s(x) = \frac{\varepsilon_2}{d+d_s+\Delta d}(V_G - V_c(x) - V_P) \qquad (12.9)$$

Curentul în canal în punctul x este dat de expresia

$$I=Q_s(x)lv(x) \qquad (12.10)$$

unde l este lărgimea porţii si v(x) este viteza electronilor în secţiunea canalului din poziţia x. Dimensiunile porţii sunt de ordinul 1 μm sau mai mici,astfel că avem de-a face cu câmpuri electrice intense, unde viteza electronilor se saturează. Există un câmp critic F_c, astfel că $v=\mu F$ pentru $F<F_c$ şi $v=v_s$ pentru $F>F_c$. Notând $F=dV_c/dx$, la câmpuri $F<F_c$, din ec.(12.9) si (12.10) se scrie

$$I = \mu l\frac{\varepsilon_2}{d+d_s+\Delta d}[V_G - V_c(x) - V_P]\frac{dV_c}{dx}$$

Integrând această ecuaţie şi având în vedere relaţiile de mai sus se obţine

$$V_c(x) = V_{GI} - \sqrt{V_{GI} - R_sI) - 2\frac{(d+d_s+\Delta d)Ix}{\varepsilon_2\mu l}} \qquad (12.11)$$

unde $V_{GI}=V_G-V_P$. Derivând (12.11) în raport cu x se obţine câmpul electric

$$F(x) = \frac{dV_c(x)}{dx} = \frac{d+d_s+\Delta d}{\mu l\varepsilon_2}[(V_{GI} - R_sI)^2 - 2\frac{(d+d_s+\Delta d)Ix}{\varepsilon_2\mu l}]^{-1/2}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Cu creşterea tensiunii de drenă, la o anumită valoare a acesteia, câmpul electric atinge valoarea de saturaţie F_s la x=L

$$F_s = F(L) = \frac{I_s}{\gamma L}[(V_{G1} - R_s I_s)^2 - \frac{2I_s}{\gamma}]^{-1/2}$$

unde I_s este curentul de saturaţie şi

$$\gamma = \frac{\mu\varepsilon_2 l}{(d + d_s + \Delta d)L}$$

Notând $F_s L = V_s$, ecuaţia de mai sus devine

$$(\frac{I_s}{\gamma})^2[(V_{G1} - R_s I_s)^2 - \frac{2I_s}{\gamma}]^{-1} - V_s^2 = 0$$

care are soluţia

$$I_s = \frac{\gamma V_s^2}{1 + (\gamma R_s V_{G1})^2}[\sqrt{1 + 2\gamma R_s V_{G1} + (V_{G1} / V_s)^2} - (1 + \gamma R_s V_{G1})]$$

Pentru R_s=0 se obţine

$$I_s = \gamma V_s^2[\sqrt{1 + (V_{G1} / V_s)^2} - 1] = \frac{l\varepsilon_2 v_s}{d + d_s + \Delta d}[\sqrt{V_{G1}^2 + V_s^2} - V_s] \qquad (12.12)$$

unde am utilizat $\mu F_s = v_s$. Din ec.(12.11) pentru R_s=0 şi x=L se obţine

$$V_c(L) = V_{G1} - \sqrt{(V_{G1})^2 - 2\frac{I_s L(d + d_s + \Delta d)}{\mu\varepsilon_2 l}}$$

Pe de altă parte

$$I_s = \frac{l\varepsilon_2 v_s}{d + d_s + \Delta d}(V_{G1} - V_{DS1}) \qquad (12.13)$$

unde V_{DS1} este tensiunea intrinseca sursă-drenă, adică fără rezistenţă serie. Din (12.12) şi (12.13) rezultă

$$V_{DS1} = V_{G1} + V_S - \sqrt{(V_{G1})^2 + V_s^2}$$

Tensiunea extrinseca sursă-drenă este

$$V_{DS} = V_{DS1} + I_s(R_d + R_s)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Pentru un dispozitiv cu canal scurt, V_s poate fi mic în comparaţie cu V_{G1} şi curentul de saturaţie I_s devine

$$I_s = \frac{\varepsilon_2 l v_s}{d_s + d + \Delta d} V_{G1}$$

MODTEC poate fi construit ca şi MOSFET cu canal iniţial si cu canal indus. Pentru tranzistorul cu canal iniţial grosimea regiunii din $Al_xGa_{1-x}As$ dopate este de 35 nm iar pentru tranzistorul cu canal indus grosimea acestei regiuni este 25 nm. In Fig.6.26 se reprezintă caracteristicile de drenă pentru un tranzistor cu canal iniţial (a) şi pentru un tranzistor cu canal indus (b); cu linie plină sunt reprezentate rezultatele teoretice iar cu linie întreruptă sunt reprezentate rezultatele experimentale.

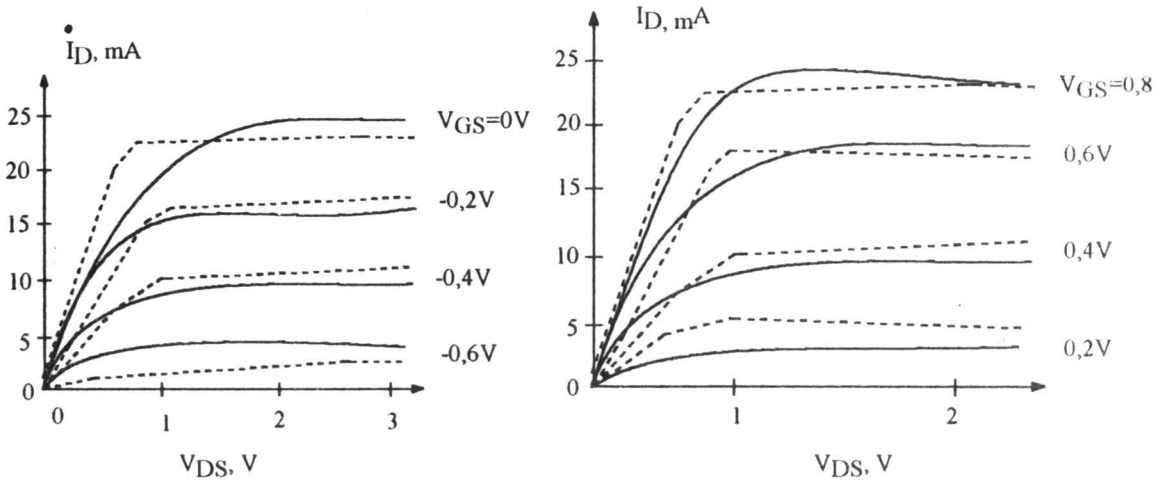


Fig. 6.26

6.13. *Alte tipuri de tranzistoare cu efect de câmp*.

In afara tranzistorului cu efect de câmp cu dopare modulată descris în paragraful precedent s-au construit în ultimul timp şi alte tipuri de tranzistoare cu efect de câmp, pe bază de heterojoncţiuni, cu performanţe deosebite. Notăm că tranzistorul cu efect de câmp cu dopare modulată se mai numeşte şi tranzistor cu efect de câmp cu gaz de electroni bidimensional (în literatura străină, TEGFET) sau tranzistor cu mobilitate mare a electronilor (în literatura străină, HEMT). O structura putin modificată faţă de cea reprezentata în Fig.6.23 a acestui tranzistor este reprezentată în Fig.6.27. Pe un substrat din GaAs semiizolator (1) se depune un strat de AlGaAs,nedopat, (2), care joacă rol de strat tampon (buffer). Peste acesta se creşte un strat de GaAs, (3), subţire (~50 nm) peste care se

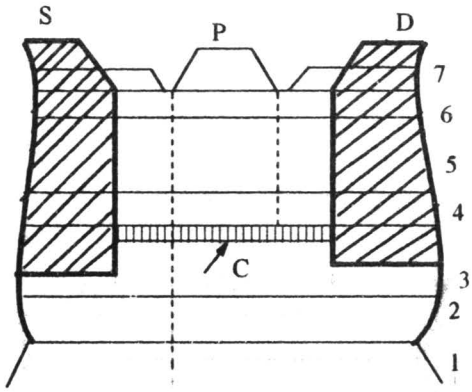


Fig. 6.27

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

depune un strat de $Al_xGa_{1-x}As$, o regiune nedopată (4) si o regiune dopată (5) cu $n=10^{18}cm^{-3}$. Peste acesta se depune un strat din GaAs (6) și apoi un strat din GaAs puternic dopat (7). Se depun apoi contactele metalice sursă (S), poartă (P) și drenă (D) așa cum se observă pe figură. Canalul de electroni care apare, notat pe figură cu C, conține gaz de electroni bidimensional. Densitatea electronilor din canal este controlată cu ajutorul tensiunii de poartă și astfel se controlează curentul dintre sursă si drenă. Diagrama de benzi de energie a acestui tranzistor este reprezentată în Fig.6.28a. Conductanța de transfer, g_t, care reprezintă raportul dintre variația curentului sursă-drenă și variația tensiunii aplicate pe poartă, crește cu creșterea barierei de potențial dintre straturile de AlGaAs (stratul tampon) și GaAs. Pentru creșterea barierei, în locul stratului din GaAs din Fig.6.28a se introduce un strat din GaInAs nedopat, subțire (~20 nm). Diagrama de benzi de energie a acestui tranzistor, numit TEGFET pseudomorf, este reprezentată in Fig.6.28b. In Fig.6.28c se reprezintă un tranzistor TEGFET inversat în care straturile GaAs nedopat și n-AlGaAs (din Fig.6.28a) sunt inversate între ele.

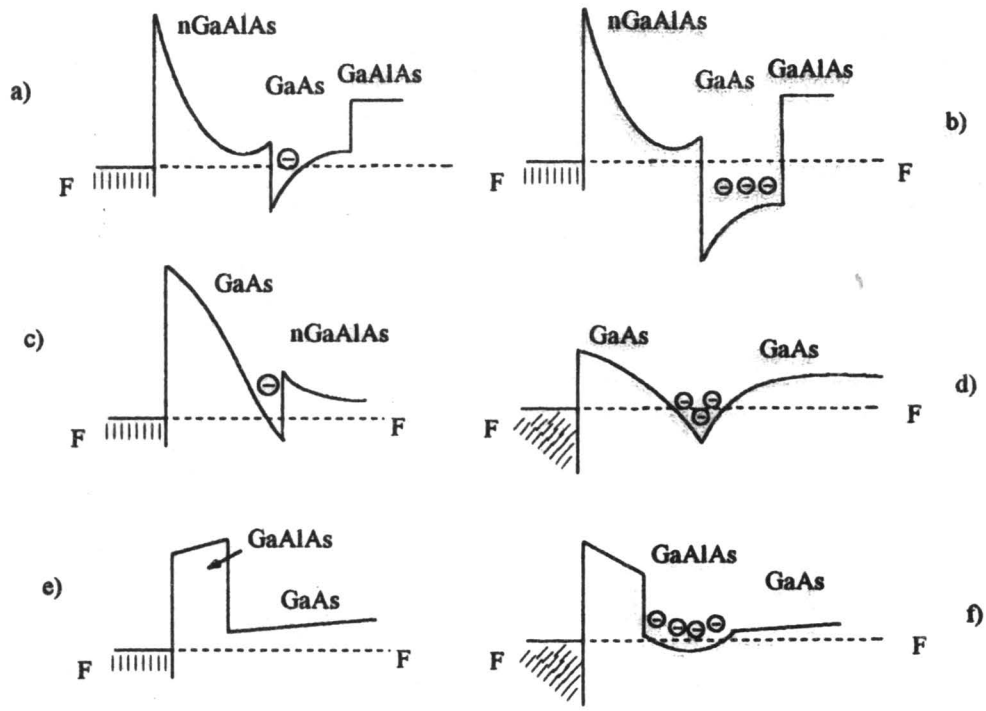


Fig. 6.28

In Fig.6.28d este reprezentat un tranzistor cu efect de câmp metal -GaAs cu o zonă foarte subțire (sub forma unei funcții δ) dopată de tip n. Acesta se numește MESFET dopat δ. Tranzistorul constă dintr-un strat subțire semiconductor din GaAs care este dopat într-o zonă foarte îngustă cu donori. Curentul între sursă și drenă este transportat prin acest strat subțire și este comandat cu ajutorul porții metalice care formează o diodă Schottky cu semiconductorul. In funcție de tensiunea aplicată pe poartă electronii sunt mai mult sau mai putin deflectați în stratul semiconductor de sub aceasta. In Fig.6.28 e este reprezentat un tranzistor cu efect de câmp, semiconductor-izolator-semiconductor, numit în literatura străină SISFET. El constă dintr-o poartă din GaAs puternic dopat situată deasupra unei bariere din AlGaAs nedopat.Acesta din urmă separă poarta de canalul care apare într-un strat din GaAs nedopat, situat sub stratul de AlGaAs. Această structură este asemănătoare cu tranzistorul MOS din

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

siliciu cu deosebirea că GaAlAs creiază o barieră de 300 meV, mult mai mică decât bariera creiată de SiO_2 (3 eV). Pentru a se evita apariţia curentului de emisie termoelectronică, SISFET funcţionează numai la temperaturi joase.Insă SISFET este important în aplicaţiile unde se utilizează tranzistori complementari deoarece atât tranzistorul cu canal de tip n cât şi cel cu canal de tip p pot fi construiţi pe acelaşi cip. Un alt avantaj este că la aceşti tranzistori fluctuaţiile tensiunii de poartă sunt mici deoarece bariera este nedopată. In Fig.6.28f este reprezentat un SISFET cu canal dopat.

6.14. *Tranzistoare bazate pe transportul electronilor perpendicular pe interfeţe.*

Limitarea frecvenţei maxime de funcţionare a tranzistoarelor cu efect de câmp la înaltă frecvenţă este determinată de timpul necesar ca purtătorii de sarcină să traverseze regiunea activă de sub poartă. Lungimea acestei regiuni (canalul,de la sursă la drenă) poate fi redusă atât cât este tehnologic posibil. Drumul parcurs de electroni între cei doi electrozi poate fi micşorat cel mai mult atunci când transportul electronilor are loc perpendicular pe interfeţe şi

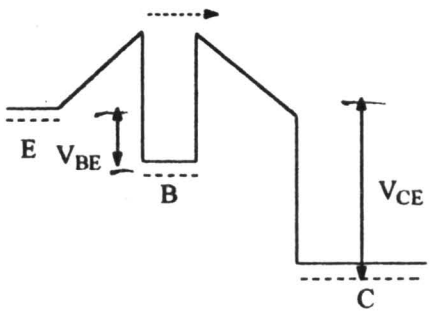


Fig. 6.29

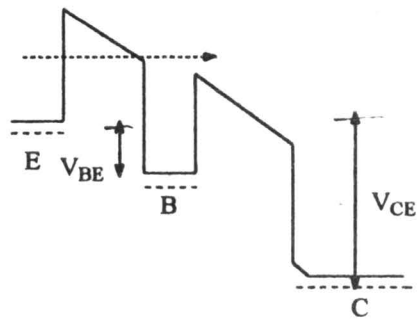


Fig. 6.30

deci nu mai este utilizat efectul de câmp. Un alt avantaj al dispozitivelor bazate pe transportul perpendicular al purtătorilor de sarcină este acela că curentul electric este direct proporţional cu aria dispozitivului astfel că acesta poate funcţiona la înalta frecvenţă la valori mari ale curentului electric. Cel mai simplu dispozitiv cu heterojonctiuni este dioda cu barieră dublă care funcţionează pe baza efectului tunel rezonant. Aceasta are două terminale. Dacă se adaugă a treia terminală, un contact cu ajutorul căruia se controlează potenţialul văii cuantice atunci se obţine un tranzistor bipolar bazat pe efectul tunel rezonant (în literatura străină BiQuaRTT: bipolar quantum resonant tunneling transistor) [36]. Dacă valea de potenţial este de tip n, fiind foarte subţire nu se poate realiza pe ea contact electric care să fie bine izolat de contactele electrice ale emitorului si colectorului, care sunt semiconductori, de asemenea de tip n. De aceea în unele cazuri valea cuantică se dopează de tip p şi astfel se obţine mai uşor o bună izolare între terminala acesteia si terminalele emitorului şi colectorului. Tranzistorul de acest tip prezintă o regiune de transconductanţă negativă. Din punct de vedere al aplicaţiilor sunt importanţi tranzistorii verticali unipolari, care funcţionează numai cu purtători majoritari. Cei mai simpli tranzistori de acest tip sunt tranzistorul cu electroni fierbinţi (în literatura străină HET: hot electron transistor) şi amplificatorul tranzistor cu tunelare cu electroni fierbinţi (în literatura străina THETA: tunneling hot electron transistor amplifier). In Fig.6.29 este reprezentată diagrama de benzi de energie a tranzistorului cu electroni fierbinţi (TEF). Emitorul E şi colectorul C sunt construiţi din GaAs de tip n. Baza B este valea de potenţial din GaAs de tip n. Barierele se construiesc din AlGaAs.Bariera de lângă emitor are

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

banda interzisa gradată. Electronii injectați peste bariera de la emitor pătrund în bază cu energie cinetică suficientă (electroni fierbinți) și traversează baza foarte rapid, fără sa sufere fenomene de împrăștiere. Variind tensiunea bază-colector este posibil sa utilizăm cea de a doua barieră ca analizor al distribuției după energie a electronilor care sosesc la colector ; aceștia reprezinta fracțiunea din numărul de electroni care traversează baza balistic (fără împrăștiere). In Fig.6.30 se reprezintă diagrama de benzi de energie a tranzistorului tunel cu electroni fierbinți. Spre deosebire de cazul anterior, unde elctronii traversează bariera de la emitor prin escaladare,în acest caz electronii traversează aceasta barieră prin tunelare și se deplasează prin bază ca electroni fierbinți.In ambele cazuri grosimea maximă a bazei din GaAs este de 29 nm pentru ca electronii să nu sufere fenomene de îmnprăștiere în această regiune. In Fig.6.31 se reprezintă diagrama de benzi de energie a tranzistorului cu electroni fierbinți cu tunelare rezonantă (în literatura străină RHET: resonant-tunneling hot electron transistor). Bariera dublă de la emitor acționează ca un filtru de electroni care lasă să pătrundă în bază numai electronii care au energia de rezonanță. Acești electroni traversează baza ca electroni fierbinți. Conductanța diferențială negativă care apare la tunelarea rezonantă introduce o transconductanță negativă în caracteristica $I_c=f(V_{BE})$ așa cum se reprezintă în Fig.6.32a. Acest tip de tranzistor poate fi utilizat pentru a creia o nouă funcție logică cum este funcția SAU-NU (NICI)-EXCLUSIV [37]. Circuitul logic corespunzător este reprezentat în Fig.6.32b.

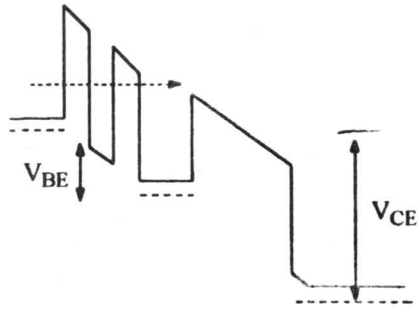


Fig. 6.31

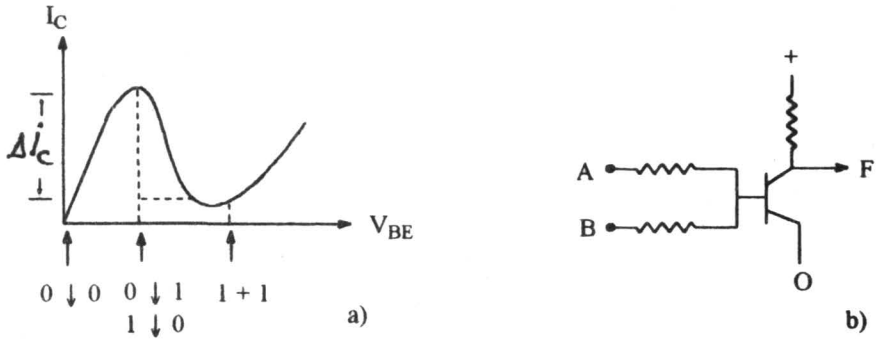


Fig. 6.32

6.15. *Tranzistorul bipolar cu heterojoncțiuni.*

Tranzistorul bipolar cu heterojoncțiuni (TBH) funcționează la frecvențe mai înalte decât dispozitivele convenționale din siliciu. El are o structură mai complexă decât tranzistorul bipolar convențional. Diagrama de benzi de energie a THB este reprezentată în Fig.6.33: emitorul este construit din AlGaAs de tip n, baza din GaAs de tip p iar colectorul din GaAs de tip n. Pentru a elimina vârfurile din banda de conducție carea apar la heterojoncțiunea AlGaAs/GaAs, această heterojoncțiune este gradată. Există o barieră mult mai mare pentru golurile care trec din bază în emitor decât pentru electronii care trec din emitor în bază astfel că factorul de injecție γ în acest caz este mult mai mare decât în tranzistorul convențional fiind aproximativ egal cu unitatea. Utilizăm notațiile uzuale: I_{neb}-

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

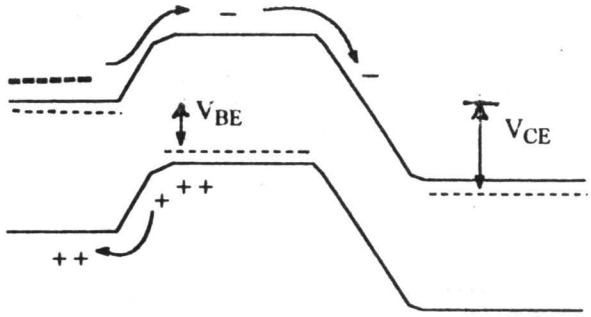


Fig. 6.33

curentul de electroni care trec din emitor în bază, I_{pbe}-curentul de goluri care trec din bază în emitor, I_r-fracţiunea din I_{neb} care se închide prin bază (prin recombinare), Fig.6.34, I_e-curentul total la heterojoncţiunea emitor-bază,I_c-curentul total la joncţiunea colector-bază, I_{cbo}-curentul invers de saturaţie la aceasta joncţiune, I_b-curentul bazei. Se defineşte factorul de injecţie

$$\gamma = \frac{I_{neb}}{I_{neb} + I_{pbe}} \tag{15.1}$$

Există următoarele relaţii între curenţii din tranzistior

$$\begin{aligned} I_e &= I_{neb} + I_{pbe} \\ I_c &= I_{neb} - I_r - I_{cbo} \\ I_b &= I_e - I_c = I_{pbe} + I_r + I_{cbo} \end{aligned} \tag{15.2}$$

Factorul de amplificare în curent continuu (în conexiunea cu emitorul comun este $\beta = I_c / I_b$. Dacă $I_r \approx 0$, ceea ce este just atunci când lărgimea bazei, w_b, este mult mai mică decât lungimea de difuzie a electronilor injectati în bază, şi I_{cbo} este mic, atunci factorul de amplificare în curent continuu este

$$\beta = \frac{I_c}{I_b} \approx \frac{I_{neb}}{I_{pbe}} \tag{15.3}$$

Expresiile curenţilor în heterojoncţiune sunt [38]

$$\begin{aligned} I_{neb} &= I_c = \frac{Aqn_{ib}^2 D_{nb}}{N_{ab} w_b} \exp(qV_{be} / kT) \\ I_{pbe} &= I_b = \frac{Aqn_{ie}^2 D_{pe}}{N_{de} w_e} \exp(qV_{be} / kT) \end{aligned} \tag{15.4}$$

unde A este aria tranzistorului, n_{ib}şi n_{ie} sunt concentraţiile purtătorilor intrinseci în bază şi, respectiv, emitor

$$\begin{aligned} n_{ib} &= (N_{cb} N_{vb})^{1/2} \exp(-E_{gb} / 2kT) \\ n_{ie} &= (N_{ce} N_{ve})^{1/2} \exp(-E_{ge} / 2kT) \end{aligned} \tag{15.5}$$

N_c şi N_v sunt densităţile efective de stări din banda de conducţie si, respectiv, de valenţă,iar E_{gb} şi E_{ge} sunt benzile interzise ale semiconductorilor care constituie baza si, respectiv, emitorul. Din ultimele trei relaţii se obţine

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$\beta = \frac{D_{nb} w_e N_{de}}{D_{pe} w_b N_{ab}} \frac{N_{cb} N_{vb}}{N_{ce} N_{ve}} \exp(\Delta E_g / kT) \qquad (15.6)$$

unde $\Delta E_g = E_{ge} - E_{gb}$. Raportul dintre β dat de ec.(15.6) pe care-l notăm β(hetero) și β(homo) care reprezinta valoarea lui β pentru tranzistorul convenţional este dat de expresia

$$\frac{\beta(\text{hetero})}{\beta(\text{homo})} = \frac{N_{ce}}{N_{ve}} \exp(\Delta E_g / kT) \qquad (15.7)$$

Pentru heterojoncţiunea AlGaAs/GaAs valoarea tipică a lui ΔE_g este 0,3 eV,astfel ca la temperatura camerei (kT=0,025 eV) se obţine $\exp(\Delta E_g/kT)=1{,}6.10^5$. Prin urmare, în tranzistorul cu heterojoncţiuni se obţine o creştere a coeficientului de amplificare a curentului de 10^5 ori mai mare decât în tranzistorul convenţional. De asemenea, din (15.6) se observă că β scade cu creşterea temperaturii şi este independent de V_{be}. Funcţionarea tranzistorului la înalţă frecvenţă este determinată de timpul de tranzit τ al electronului

$$\tau = \tau_e + \tau_b + \tau_c \qquad (15.8)$$

τ_e este timpul de întârziere la emitor, τ_b este timpul de tranzit prin regiunea bazei, iar τ_c este timpul de tranzit prin regiunea de barieră a joncţiunii colector-bază. Timpul de întârziere la colector este

$$\tau_e = \frac{w_e}{2N_{de}} \frac{w_b N_{ab}}{D_{nb}} \exp\left(-\frac{\Delta E_g}{kT}\right) \qquad (15.9)$$

Celelalte componente ale timpului de tranzit sunt aceleaşi ca şi în tranzistorul convenţional

$$\tau_b = \frac{w_b^2}{2D_{nb}}; \qquad \tau_c = \frac{w_c}{2v} \qquad (15.10)$$

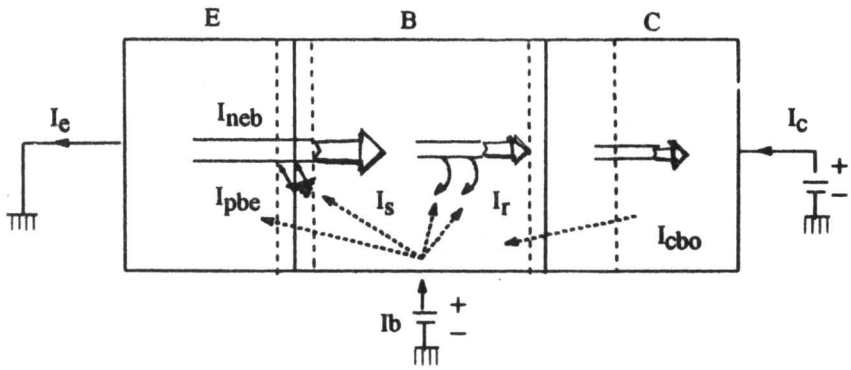


Fig. 6.34

unde w_c este lărgimea stratului de barieră de la colector iar v este viteza electronului limitată de imprăştiere, în această regiune. In continuare, luăm în considerare curentul de generare-recombinare în regiunea barierei. Se cunoaşte că în joncţiunile din semiconductori cu bandă interzisă largă, cum este GaAs, curentul de generare-recombinare este dominant la tensiuni

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

mici la polarizare directă și la polarizare inversă. Apare evident că acest curent este dominant și în heterojonctiunea AlGaAs/GaAs. Sa considerăm cazul simplificat când curentul degenerare-recombinare I_s este mai mare decât curentul I_{pbe}. In acest caz

$$\beta = \frac{I_{neb} - I_r - I_{cbo}}{I_{pbe} + I_s} \approx \frac{I_{neb}}{I_s} \qquad (15.11)$$

Notăm ca I_r este curentul de recombinare în bază iar I_s este curentul de recombinare în regiunea barierei emitor-bază. Curentul de recombinare este dat de expresia

$$I_s = I_o \exp(qV_{be} / 2kT); \qquad I_o = \frac{qAX_D}{2\tau_o} n_{ib}$$

X_D este lărgimea stratului de barieră al heterojonctiunii emitor-bază iar τ_o este timpul de viață a purtătorilor de sarcină în această regiune. Se obține

$$\beta = \frac{2D_{nb}\tau_o}{w_b N_{ab} X_D} n_{ib} \exp(qV_{be} / kT)$$

Având în vedere valoarea lui n_{ib} (15.5) rezultă

$$\beta = C\exp[-\frac{E_{gb} - qV_{be}}{2kT}]; \qquad C = \frac{2D_{nb}\tau_o}{w_b N_{ab} X_D}(N_{cb}N_{vb})^{1/2} \qquad (15.12)$$

Se observă că spre deosebire de cazul când s-a neglijat curentul de recombinare, în acest caz β depinde exponențial de tensiunea V_{be}. In plus, contribuția factorului exponențial care cuprinde ΔE_g la creșterea lui β dispare. De aceea este indicat să fie redus la minim curentul de recombinare I_s din regiunea stratului de barieră prin construirea heterojonc-țiunii cu minimum de defecte și centre de recombinare. TBH are o structură mai complexă decât tranzistorul bipolar convențional ceea ce face mai dificilă integrarea sa intr-o structură planară. Structura unui TBH n-p-n cu heterojoncțiune AlGaAs/GaAs este reprezentată în Fig.6.35.

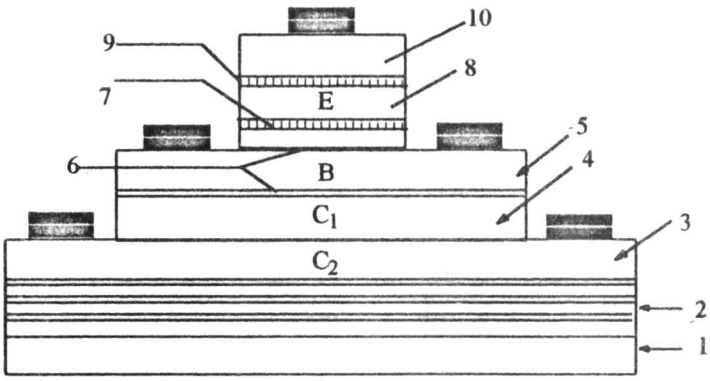


Fig. 6.35

Pe un substrat semiizolator din GaAs(1) se depune o superreţea (2) din GaAs/AlGaAs care joacă rol de strat tampon pentru a minimaliza tensiunile mecanice între substratul izolator și straturile active ale dispozitivului. Peste aceasta se depune un strat n^+GaAs (3) peste care se depune un strat n-GaAs (4) (colectorul), Peste colector se depune un strat de p-GaAs (baza) (5). De o parte si de alta a stratului bazei se depun două straturi subțiri (6) din GaAs nedopat, care joacă rol de straturi tampon pentru a stopa migrarea beriliului din baza de tip p în emitor

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

sau în colector. Peste stratul bazei se depune stratul emitor din n- AlGaAs (8) iar peste acesta se depune un strat de n-GaAs. Joncţiunea este gradată între GaAs şi $Al_xGa_{1-x}As$ cu x variind de la 0 la 0,3,pentru a se înlătura vârfurile care apar la discontinuităţile dintre benzile a doi semiconductori diferiţiZonele gradate (liniar) sunt notate pe figură cu 7 si 9. In prezent nu există o structură standard a TBH. Pentru construcţia TBH se utilizează heterojonctiunea emitor pe bază de Si/SiGe (Si-n este emitorul şi SiGe-p este baza, deoarece acesta din urmă are banda interzisă mai mică), heterojoncţiunea AlGaAs/GaAs, heterojoncţiunea InP/InGaP, etc.TBH cu heterojonctiunea InP/InGaP prezintă importanţă deoarece sunt compatibili cu detectorii care funcţionează pe lungimile de undă de 1,3 si 1,55 μm si se utilizează la comunicaţiile prin fibre optice. In Tabela 6.1 se prezintă parametrii unui tranzistor TBH cu heterojoncţiune AlGaAs/GaAs în comparaţie cu parametrii unui tranzistor convenţional bipolar din siliciu [39].

Tabela 6.1

Parametrul	AlGaAs/GaAs	Si
Concentraţia de dopare în emitor, cm^{-3}	5.10^{17}	3.10^{20}
---------- în bază	1.10^{20}	5.10^{17}
---------- în colector	6.10^{16}	6.10^{16}
lărgimea bazei, μm	0.06	0,06
capacitatea barierei E/B,F/cm^2	$1,5.10^{-7}$	$1,8.10^{-7}$
---------- C/B,--	$6,6.10^{-8}$	$6,4.10^{-8}$
capacitatea substratului,F/cm^2	0	$1,4.10^{-8}$
rezistenţa bazei intrinseci, kΩ/	0,17	10,1
I_c la f_T maxim,A/cm^2	$2\text{-}4.10^4$	$1\text{-}2.10^4$
frecvenţa limită f_T (V_{CB}=1,5V),GHz	54	20

Cel mai mult este studiat TBH cu heterojoncţiune din AlGaAs/GaAs. Dezavantajul acestui sistem este viteza mare de recombinare la suprafaţă a purtătorilor de sarcină si curentul mare de generare-recombinare în regiunea barierei E/B.Aceasta reduce amplificarea în curent şi introduce o dependenţă a acesteia de tensiunea emitor-bază. TBH bazaţi pe InP si InGaAs nu au acest dezavantaj, însă tehnologia acestor materiale este mai puţin dezvoltată decât a GaAs si AlGaAs. In TBH bazaţi pe si/SiGe curentul de generare-recombinare este de asemenea mic, se obţine o amplificare a curentului egală cu 5000 si f_T=30 GHz.In anumite aplicaţii TBH oferă avantaje semnificative faţă de MESFET şi HEMT.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Bibliografie

1.J.A.Sequoia,G.E.Stillman,C.H.Wolfe,Thin solid Films,31,69(1076).
2.L.Esaki,R.Tsu,IBM Res.Develop.14,61(1970).
3.I.Sollner,W.Goodhue,P.Tannenwald,C.Parker,D.Peck,Appl.Phys.Lett.43,588(1983).
4.R.Tsu,L.Esaki,Appl.Phys.Lett.22,562(1973).
5.M.Jmehiya,H.Sakaki,Appl.Phys.Lett.50,1503(1986).
6.M.J.Paulus et al,Appl.Phys.Lett.53,20491988).
7.S.K.Dimond et al,IEEE Electron.Device Lett.EDL-10,104(1989).
8.K.K.Choi,B.F.Levine,R.J.Malik,J.Walker,C.Bethea,Phys.Rev.B35,4172(1987).
9.R.Kazarinov,R.Suris,Sov.Phys.Semicond.6,120(1972).
10.V.Dolocan,Fenomene de tunelare si aplicaţii,Ed.Stiinţifică şi Enciclopedică,1989.
11.K.Choi,B.Levine,C.Bethea,J.Walker,R.Malik,Appl.Phys.Lett.50,1814(1987).
12.K.Choi,B.Levine,N.Jarosik,J.Walker,R.Malik,Phys.Rev.B38,12362(1988).
13.R.Landauer,Localization Interactions and Transport Phenomena, ed.B.Kramer, G.Bergmann, Y.Bruinserade, Springer,1985.
14.Directions in condensed matter physics,ed.G.Gridstein,G.Mazenco,World Scientific,Singapore,1986.
15.Transport phenomena in mesoscopic systems,ed.H.Fukuyana,T.Ando,Springer-Verlag,1992.
16.Physics and technology of submicron structures,ed.H.Heinrich, G.Bauer,F.Kuchar, Springer,1988.
17.R.Landauer,IBM J.Res.Dev.1,223(1957),Philos.Mag.21,863(1970).
18.J.Spector et al,Appl.Phys.Lett.56,1290(1990).
19.U.Sivan et al, Phys.Rev. B41,7937(1990).
20.H.Baranger,D.Di Vincenzo,R.Jalabert,A.Stone,Phys.Rev,B44,10637(1991).
21.B.J.van Wess et al,Phys.Rev.Lett.62,2523(1989).
22.P.van Loosdrecht et al,Phys.Rev.B38,10162(1988).
23.J.Jain,S.Kivelson,Phys.Rev.Lett.60,1542(1988).
24.B.I.Halperin,Phys.Rev.B25,2185(1982).
25.K.K.Licharev,Rev.Mod.Phys.51,101(1979).
26.C.Urbino et al,IEEE Trans.Magn.27,2578(1991).
27.P.L.Mc Euen et al,Phys.Rev.Lett.62,2523(1989).
28.D.C.Tsu,A.C.Gossard,Appl.Phys.Lett.38,550(1981).
29.K.von Klitzing,G.dorda,M.Pepper,Phys.Rev.Lett.45,494(1980).
30.T.J.Quinn,Metrologie,26,69(1989).
31.D.G.Tsui,P.L.Stormer,A.C.Gossard,Phys.Rev.Lett.48,1559(1982).
32.H.L.Stormer,A.Chang,D.C.Tsui,J.C.Hwang,A.C.Gossard,W.Wiegmann,Phys.Rev.Lett.50,1953(1983).
33.R.B.Laughlin,Phys.Rev.Lett.50,1595(1983).
34.J.C.Maan în Two-dimensional systems,heterostructures and superlattices, ed.G.Bauer, F.Kuchar, H.Heinrich, Solid State Science,vol.53,Springer,1984.
35.H.Markoes,Molecular beam epitaxy and heterostructures,NATO ASI,1985.
36.M.A.Reed,W.Fensley,R.Matin,J.Randolt,A.Seabaugh,Appl.Phys.Lett.54,1034 (1989).
37.N.Yokoyana,K.Imamura,S.Muto,S.Hiyamiza,H.Nishi,Jpn.J.appl.Phys.24,L853 (1985).
38.H.Kressel,Proc.IEEE 30,13(1982).
39.F.Ashburn,A.Rezazadell,F.Chor,A.Brunschweller,IEEE Solid State Circuits,SC-24,112(1989).

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Capitolul VII

Epitaxia cu fascicule moleculare

7.1. *Considerații generale.*

Epitaxia cu fascicule moleculare este un proces de creștere epitaxială a compușilor semiconductori sub formă de straturi subțiri, care are loc prin reacția unor fascicule moleculare (ori atomice) ale elementelor constituiente, de energie termică, cu suprafața unui substrat monocristalin menținut la o temperatură adecvată pentru a permite creșterea epitaxială, în vid ultraînalt. Predecesorul acestei tehnici este fizicianul francez L. Dunoyer care în anul 1911 a obținut primul fascicul molecular. Aparatul construit de Dunoyer (Fig.7.1) constă dintr-un tub de sticlă vidat prevăzut cu două constricții. In primul compartiment se introduce sodiu. Dacă acesta se încălzește, la capătul compartimentului opus se depune un strat de sodiu pe o arie care poate fi cuprinsă de către atomii care sosesc trecând in linie dreaptă prin cele două constricții. Aparatul lui Dunoyer este prototipul tuturor dispozitivelor moderne de fascicule moleculare. Un asemenea dispozitiv trebuie să conțină următoarele elemente: (1) o sursă de molecule (în mod uzual, un evaporator) prevăzută cu o apertură prin care moleculele pot sa iasă în vid; (2) o a doua apertură colimatoare care formează fascicolul prin stoparea sau deflexia tuturor moleculelor care nu trec în linie dreaptă prin ea și (3) un dispozitiv pentru detectarea efectelor diverselor cauze asupra fascicolului. Următorul pas a fost făcut de către Gunther [1] care a obtinut straturi subțiri din compusii III-V utilizând metoda fasciculelor moleculare multiple. Această metodă este cunoscută sub numele de tehnica a trei temperaturi și constituie originea epitaxiei cu fascicule moleculare. Pentru obținerea straturilor subțiri stoichiometrice din compușii III-V, Gunther a utilizat o sursă pentru elementul din grupa a V-a la temperatura T_1 astfel încât să se mentină o presiune staționară în camera de vid, o sursă pentru elementul din grupa a III-a la o temperatură T_3 mai mare pentru controlul ratei de condensare a compusului pe substrat și un suport al substratului menținut la o temperatură intermediară T_2 suficient de mare pentru a evita condensarea în exces a elementului din grupa a V-a pe substrat (Fig.7.2). Imbunătățirile

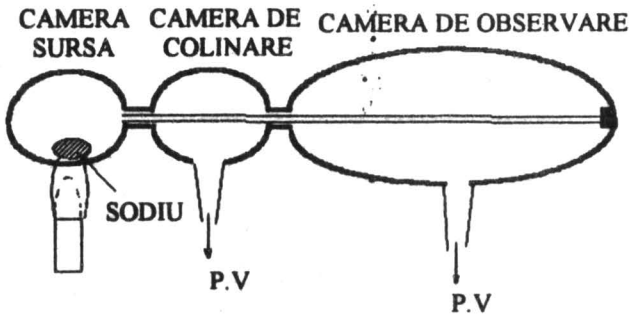


Fig. 7.1

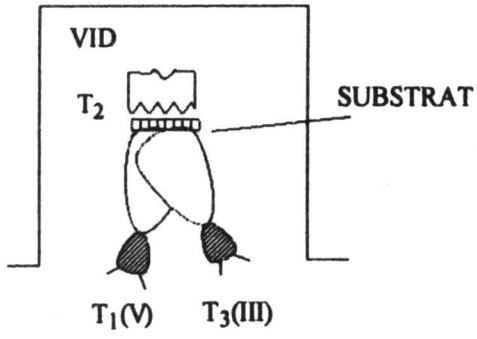


Fig. 7.2

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

ulterioare ale tehnicii de epitaxie cu fascicule moleculare constau în dezvoltarea tehnicii vidului ultraînalt și creșterea purității monocristalului substrat. Caracteristicile principale ale epitaxiei cu fascicule moleculare sunt următoarele: (1) rată de creștere mică, 0,1-0,3 nm/s pentru GaAs; (2) temperatura joasa de creștere (pentru GaAs temperatura suportului este $T_2 \leq 630°C$); (3) posibilitatea întreruperii abrupte și inițierii abrupte a creșterii; (4) planeitatea suprafeței cristalului în timpul creșterii acestuia; (5) posibilitatea analizei in situ (în timpul procesului de creștere).

7.2. *Fascicule moleculare.*

Considerăm o sursă de evaporare în care presupunem că vaporii sunt în condiții apropiate de starea de echilibru termic. Moleculele gazului sunt in continuă mișcare si vitezele lor depind de temperatură. Notăm cu n numărul de molecule pe unitatea de volum și cu f(v) funcția de distribuție a acestora după viteze. Numărul de molecule care au viteza cuprinsă în intervalul v și v+dv este

$$dn=nf(v)d^3v$$

unde $d^3v=4\pi v^2dv$ este volumul în spațiul vitezelor cuprins între sferele de raze v și v+dv. Sunt satisfăcute relațiile

$$\int_0^\infty 4\pi v^2 f(v)dv = 1; \qquad \int_0^\infty nf(v)4\pi v^2 dv = n \tag{2.1}$$

Functia de distribuție dupa viteze, f(v), este funcția lui Maxwell

$$f(v)=c\exp(-bv^2)$$

unde c și b sunt constante. Din prima ecuație (2.1) se obține

$$4\pi c\int_0^\infty \exp(-bv^2)v^2dv = \pi c\sqrt{\frac{\pi}{b^3}} = 1$$

Rezultă, $c=\sqrt{b^3/\pi^3} = (b/\pi)\sqrt{b/\pi}$. Se consideră b=m/2kT=M/2RT, unde m este masa unei molecule, $M=mN_A$ este masa molară,N_A este numărul lui Avogadro, k este constanta lui Boltzmann, R este constanta gazelor perfecte și T este temperatura absolută. Se obține

$$f(v) = \left(\frac{M}{2\pi RT}\right)^{3/2} \exp(-\frac{M}{2RT}v^2); \qquad dn = \frac{4}{\sqrt{\pi}}n\left(\frac{M}{2RT}\right)^{3/2} v^2\exp(-\frac{M}{2RT}v^2)dv$$

Aceasta este legea de distribuție Maxwell-Boltzmann. Funcția de distribuție $f_1(v)$ definita prin relația $dn=nf_1(v)dv$,

$$f_1(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{M}{2RT}\right)^{3/2} v^2\exp(-\frac{M}{2RT}v^2)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

are valoarea zero la v=0 și v=∞ și valoarea maxima la

$$v_M = \left(\frac{2RT}{M}\right)^{1/2} = 1{,}289.10^2\left(\frac{T}{M}\right)^{1/2}, m/s \qquad (2.2)$$

Aceasta este viteza cea mai probabilă și se gasește din condiția $df_1/dv=0$. Se mai definesc: viteza medie

$$\bar{v} = \frac{1}{n}\int_0^\infty v dn = \frac{4}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{M}{2RT}\right)^{3/2}\int_0^\infty v^3 \exp(-\frac{M}{2RT}v^2)dv = \left(\frac{8RT}{\pi M}\right)^{1/2} = 1{,}456.10^2(\frac{T}{M})^{1/2} =$$

$$1{,}455.10^2(\frac{T}{M})^{1/2}, m/s$$

unde s-a utilizat relația

$$\int_0^\infty v^3 \exp(-bv^2)dv = \frac{1}{2b^2}$$

viteza pătratică medie

$$< v^2 >= \frac{1}{n}\int_0^\infty v^2 dn = \frac{4}{\sqrt{\pi}}(\frac{M}{2RT})^{3/2}\int_0^\infty v^4 \exp(-\frac{M}{2RT}v^2)dv = \frac{3RT}{M}$$

unde s-a utilizat relația

$$\int_0^\infty v^4 \exp(-bv^2)dv = \frac{3}{8}\sqrt{\frac{\pi}{b^5}}$$

Rădăcina pătrată din viteza pătratică medie este $v_r=(3RT/M)^{1/2}$. Viteza pătratică medie se utiizează la calculul energiei. Energia cinetică medie a unei molecule este dată de expresia

$$\bar{E} = \frac{1}{n}\int_0^\infty \frac{1}{2}mv^2 dn = \frac{3}{2}\frac{mRT}{M} = \frac{3}{2}kT$$

Pe de altă parte la calculul fluxului de molecule sau a drumului liber mediu al moleculelor se utilizează viteza medie. Numărul mediu de molecule, F, incidente în unitatea de timp pe unitatea de suprafață a peretelui este dat de expresia

$$F = \int_{v_z>0} v_z dn = \frac{1}{4}n\bar{v}; \quad v_z = v\cos\theta$$

Notăm că în multe cazuri se utilizează expresia inexactă $F=(1/6)n\bar{v}$. Având în vedere legea gazelor perfecte P=nkT se obține

$$F = P\left(\frac{1}{2mkT}\right)^{1/2} = 3{,}51.10^{22}\frac{P}{\sqrt{MT}}, molec./cm^2.s$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde P se exprimă în torr. Această formulă se utilizează, de asemenea, pentru calculul cantităţii de gaz care trece printr-un orificiu mic efectuat într-un perete subţire al unei incinte în care există presiunea joasă. Masa care traversează unitatea de arie a orificiului în unitatea de timp este

$$G = mP\left(\frac{1}{2\pi mkT}\right)^{1/2} = 5{,}83.10^{-2}P\sqrt{\frac{M}{T}}, g/cm^2.s$$

Numărul de molecule care ies prin unitatea de arie din orificiu în unitatea de timp, în unghiul solid $d\Omega$ (Fig.7.3) este funcţie de unghiul β faţă de linia care trece, perpendicular, prin centrul orificiului [2]

$$dF = \frac{n\bar{v}\cos\beta}{4\pi}d\Omega$$

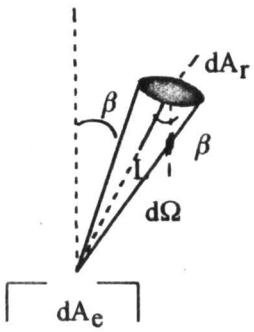


Fig. 7.3

Din această relaţie se observă că emisia moleculelor dintr-un orificiu mic nu se face uniform, însă sunt favorizate direcţiile normale la suprafaţa emisivă. Distribuţia unghiulară a fluxului (fluxul raportat la unitatea de unghi solid) materialului evaporat dintr-un creuzet cu suprafaţa emisivă A_e este dată de expresia

$$\frac{dF}{d\Omega} = 1{,}12.10^{22}A_e\frac{P}{\sqrt{MT}}\cos\beta$$

In această relaţie presiunea P din creuzet este exprimată în torr. Unghiul solid $d\Omega$ (Fig.7.3) este definit de expresia

$$d\Omega = \frac{\cos\beta}{L^2}dA_r$$

unde A_r este suprafaţa pe care sosește fasciculul molecular, aflata la distanţa L de sursă; normala la această suprafaţă formează unghiul β cu fasciculul de molecule cuprins în unghiul $d\Omega$. Din ultimele două relaţii se obţine numărul de molecule care sosesc pe unitatea de suprafaţă receptoare

$$\frac{dF}{dA_r} = 1{,}12.10^{22}A_e\frac{P}{\sqrt{MT}}\frac{\cos^2\beta}{L^2}, \text{molec/cm}^2.\text{s} \qquad (2.3)$$

La β=0 se obţine densitatea de flux pe un substrat situat normal pe axa creuzetului. Numărul de molecule adsorbite pe substrat se obţine înmulţind aceasta expresie cu coeficientul de alipire, s. O altă mărime importantă în epitaxia cu fascicule moleculare este drumul liber mediu, λ, al moleculelor. El se defineşte ca distanţa medie pe care o traversează o moleculă între două coliziuni consecutive cu celelalte molecule din gaz şi se obţine din relaţia $\lambda = \bar{v}\tau$ unde τ este timpul mediu dintre două coliziuni consecutive ale unei molecule. Secţiunea de coliziune a moleculelor una cu alta este $\sigma = \pi(2r)^2 = 4\pi r^2$ (deoarece o coliziune se produce de fiecare dată când două molecule trec una pe lângă alta la o distanţă între centrele lor mai mică

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

decât 2r), unde r este raza moleculei. Volumul măsurat de această secţiune când molecula traversează distanţa λ este $\sigma\lambda$. Presupunem că acest volum conţine în medie o singură moleculă, adică $(\sigma\lambda)n\approx1$, deoarece λ reprezinta distanţa medie pe care o traverseaza o moleculă înainte de a suferi o coliziune cu altă moleculă. Rezultă $\lambda\approx1/\sigma n$. Un calcul mai exact dă

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi n(2r)^2}$$

Utilizând legea gazelor perfecte P=nkT se obţine

$$\lambda = \frac{kT}{\sqrt{2}\pi(2r)^2 P} = 2{,}33.10^{-20}\frac{T}{(2r)^2 P}$$

Pentru deducerea relaţiei (2.3) si a clorlalte relaţii anterioare ei s-au neglijat coliziunile dintre molecule, adica s-a considerat gazul ideal. Această aproximaţie este valabilă atunci când λ este mult mai mare decât diametrul D al orificiului prin care iese fasciculul molecular (principiul efuziei), adica $\lambda/D>>1$. λ/D se numeşte numărul luii Knudsen. In realitate un creuzet are forma unui tub de lungime d şi diametru D. In această situaţie pentru satisfacerea principiului efuziei este necesar ca la condiţia de mai sus să se adauge condiţia $\lambda/l>>1$. Expresia de mai sus scrisă pentru unghiul solid $d\Omega$ este valabilă numai când l=0, adică atunci când creuzetul tubular este complet plin cu material. In timpul evaporării nivelul materialului scade din tub, l creşte si tubul se comportă ca un colimator. In aceasta situaţie relaţia (2.3) se înlocuieşte cu relaţia

$$\frac{dF}{d\Omega} = 1{,}12.10^{22} A_e \frac{P}{\sqrt{MT}} f(\beta)$$

Factorul unghiular $f(\beta)$ este reprezentat în fig.7.4 pentru diverse nivele l ale topiturii în creuzetul cu diametrul D=2R. Această distribuţie unghiulară este valabila în condiţiile gazului ideal. De exemplu pentru l/D=0, condiţia de efuzie este satisfăcută numai dacă l/D≥20. In epitaxia cu fascicule moleculare creuzetele utilizate pentru evaporare nu îndeplinesc întocmai condiţiile unei celule de efuzie Knudsen, deoarece orificiile acestora nu sunt atât de mici în comparaţie cu dimensiunile lor. De aceea ecuaţiile deduse mai sus nu sunt decât aproximativ valabile. In încheierea acestui paragraf prezentam o aplicaţie numerica pentru creşterea compusului GaAs. Relaţia dintre presiunea de vapori P si temperatura unei surse de emisie (celula de efuzie) este

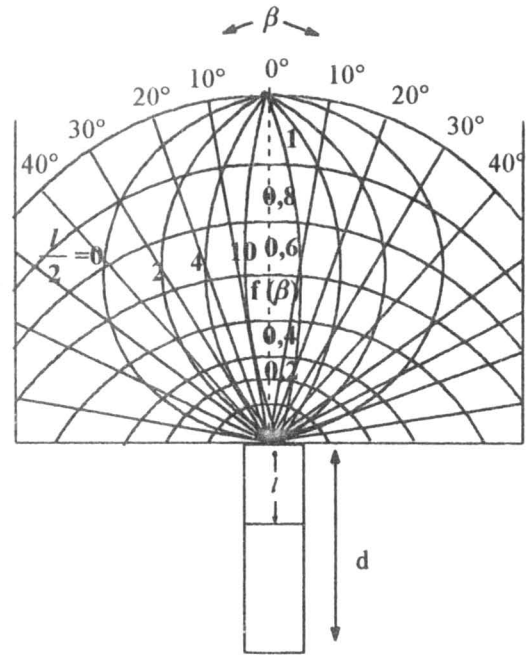


Fig. 7.4

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$\log P = \frac{A}{T} + B\log T - C$$

A, B, C sunt constante, care pentru galiu au valorile A=-11021,9; B=7; C=15,42. In cazul acestui material, la T=960°C=1233K se obţine P=1,87.10^{-3}Torr. Pentru o celulă de efuzie de tip RIBER 125 cu diametrul orificiului D=20 mm, atunci când distanţa de la orificiu la substrat este egală cu 125 mm, densitatea de flux calculată din ec. (2.3) pentru β=0 este egala cu 1,44.10^{15} atomi/cm^2.s. In procesul de creştere a GaAs temperatura suportului este între 500°C şi 600°C şi în aceste condiţii coeficientul de alipire a Ga este egal cu unitatea si prin reacţia cu fluxul de atomi de As, care cad in număr echivalent pe suprafaţa substratului, se obţine compusul stoichiometric GaAs. Un strat monoatomic de Gaas are constanta reţelei a=0,56532 nm si conţine

$$\frac{2}{(5{,}6532.10^{-8})^2} = 6{,}258.10^{14}\text{atom / cm2}$$

Factorul 2 apare deoarece există doi atomi pe celulă. Rata de creştere este dată de expresia

$$\frac{2.1{,}44.10^{15}}{6{,}258.10^{14}} \cdot \frac{0{,}56532}{4} = 0{,}65 \text{ nm/s}=2{,}34\ \mu\text{m/h}$$

Daca temperatura celulei de Ga creşte cu ΔT=1°C dela 960°C la 961°C, densitatea de flux de atomi de Ga devine 1,48.10^{15}atomi/cm^2.s ceea ce conduce la o variaţie a ratei de creştere cu 2,7%. Energia cinetică medie a atomilor de galiu, în acord cu relatia de mai sus este E=0,16 eV. Drumul liber mediu pentru 2r=0,141 nm este λ=77 cm. Numărul Knudsen pentru o celulă cu diametrul D=20 mm este λ/D=77/2=38,5 iar dacă celula are lungimea d=90 mm şi este pe jumătate plină λ/l=77/4,5=17. Deci fluxul de Ga poate fi considerat ca un fascicul molecular. Dacă distanţa de la celula de efuzie la substrat L=65 mm, pentru creşterea straturilor de GaAs cu o rată de creştere cuprinsă între 0,3 şi 1 μm/h sunt necesare următoarele densităţi de flux la temperaturile corespunzătoare [4]

10^{14}-10^{15} Ga/cm^2.s la 930-980°C
10^{14}-10^{15} Al/cm^2.s la 1070-1130°C
10^{15}-10^{16} As_4/cm^2.s la 300-330°C.

7.3. *Celule de efuzie.*

O celulă de efuzie trebuie să îndeplinească următoarele condiţii: (1) un flux lent al moleculelor care ies prin orificiul său şi (2) reactie neglijabila între materialul conţinut si materialul celulei. Prima condiţie este impusă de principiul efuziei, astfel ca moleculele din interiorul celulei să rămână practic în echilibru, deşi numărul lor total descreşte lent. A doua condiţie este impusă de diminuarea şi chiar eliminarea impurităţilor în fasciculul molecular. Creuzetul celulei de efuzie se construieşte din grafit sau din nitrură de bor pirolitică (PBN) de înaltă puritate. Grafitul are avantajul ca are preţ de cost scăzut, se prelucrează uşor, permite o bună stabilitate termică şi un control precis al temperaturii. Insă degazarea grafitului este mai dificilă şi este chimic mai reactiv decât PBN; de exemplu pentru evaporarea aluminiului nu se poate folosi celulă de grafit. Prin urmare, deşi nitrura de bor pirolitică are preţ de cost mare şi

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

necesita timp lung depreparare, va deveni materialul principal pentru construcţia celulelor de efuzie. Celulele de evaporare utilizate în epitaxia cu fascicule moleculare au orificiul prin care ies moleculele mai mare decât la o celulă Knudsen (care satisface condiţia (1)) deoarece este necesar să se obţină depunere epitaxială pe suprafaţă mare cu grosime uniformă şi cu rata de creştere moderată. Intrucât dimensiunile geometrice ale celulei nu pot fi calculate cu precizie se procedează la monitorizarea (controlul) internitentă a fasciculului molecular folosind un spectrometru de masă si o jojă ionică de măsură şi un sistem de reglare automată a temperaturii. Proiectarea de celule de efuzie pentru epitaxia cu fascicule moleculare care să furnizeze fluxuri suficient de mari si de stabile a fost făcută de către Foxon şi colaboratorii [5], Foxon [6], Cho şi Arthur [7], Smith şi Pickardt [8], Ploog [9], Roulet şi Alexandre [10], etc. O celulă de efuzie este reprezentata în Fig. 7.5. Incălzirea celulei se face utilizând un fir de tantal helicoidal susţinut de doi cilindri din alumină, concentrici. In interiorul cilindrului interior se găseşte creuzetul tubular din grafit (spectroscopic pur) de forma literei H. In partea superioară ceuzetul conţine materialul pentru evaporat iar în partea inferioară este fixat un termocuplu W/W-Re, care este introdus într-un tub de alumină, a cărui sudură vine în contact direct cu creuzetul. Intr-o asemenea configuraţie temperatura înregistrată de către termocuplu diferă cu ±3°C de temperatura sursei de evaporare. Cilindrul de alumină exterior este înconjurat de câteva ori de o folie subţire de tantal, ondulată, pentru a se asigura o izolare termică efectivă a celulelor între ele. Fiecare celula de efuzie este montată pe un suport de molibden care este prevăzut cu elementele necesare pentru ajustarea corectă şi demontarea rapidă a celulei. Molibdenul şi tantalul se folosesc exclusiv pentru suport şi conexiunile electrice ale celulei. O asemenea celulă îndeplineşte următoarele condiţii: răspuns termic rapid, încălzire uniformă, pierdere mică de putere radiantă. Creuzetul are capacitatea de 2,5 cm^3 pentru elementele din grupa a III-a şi pentru dopant şi 20 cm^3 pentru elementele din grupa a V-a. Pentru celulele mici diametrul aperturii (orificiului) este de 3 mm iar pentru celulele mari de 5 mm. Dacă creuzetul se construieste din PBN atunci firul de tantal al cuptorului de încălzire se înfăşoară direct pe creuzet. Temperaturta la care funcţioneaza celulele de efuzie este cuprinsa între 250°C si 1400°C. Stabilitatea precisă a temperaturii si reproductibilitatea sunt esenţiale deoarece o fluctuaţie a temperaturii de ± 1°C determină o variaţie a fluxului molecular cu ±2-4%. Deoarece rata de creştere a stratului subţire este proporţională cu densitatea de flux a elementului din grupa a III-a (a se vedea permite modificarea (întreruperea) bruscă a intensităţii fasciculului în timpul creşterii paragraful 7.5) fluctuaţiile temperaturii cauzează fluctuaţii de acelasi ordin de mărime ale ratei de creştere. In cazul compuşilor ternari fluctuaţiile temperaturii determină fluctuaţii ale compoziţiei acestora. Pentru obţinerea materialelor semiconductoare de bună calitate este necesară o izolare termica bună a ansamblului celulelor de restul incintei de creştere pentru a minimaliza gazarea din pereţi. Aceasta se realizează prin utilizarea unui manşon de azot lichid. In cele

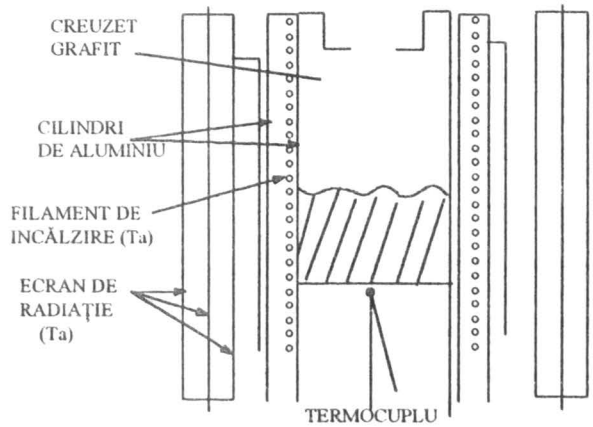


Fig. 7.5

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

mai multe sisteme de epitaxie cu fascicule moleculare fiecare celulă de efuzie este prevăzută cu un obturator mecanic care stratului epitaxial. Obturatoarele pot fi puse în miscare din exterior prin rotire directă sau electropneumatic. Obturatoarele se confecţionează din metale refractare pentru a se evita reacţiile chimice dintre materialul obturatorului și al celulei. Inainte de fiecare depunere, celulele de efuzie (cu excepţia celei de As) se degazează la o temperatură fixată , ~50° deasupra temperaturii de funcţionare, timp de 30 minute și apoi se fixează la fluxul de lucru. Fluxul poate fi măsurat folosind o jojă de ionizare plasată în poziţia pe care o ocupă în mod normal substratul în timpul creșterii.

7.4. *Componentele instalaţiei de epitaxie cu fascicule moleculare.*

O instalaţie complexă de epitaxie cu fascicule moleculare conţine mai multe camere, interconecvtate între ele, fiecare îndeplinind următoarele funcţii: camera de introducere și pregătire a substratului, camera de creștere și camera de analiză a probelor în vid ultraînalt. Toate aceste camere sunt prevăzute cu pompe de realizare a vidului ultraînalt, cum ar fi pompe ionice cu sublimare cu titan și He lichid. Camera principală este camera de creștere. In Fig. 7.6 este reprezentata schema unei instalaţii simple care contine camera de crestere și camera de introducere a probei, cu sistemul de transfer între cele două. Camera de creștere este construită dintr-un clopot din inox cu diametrul de 450 mm, celulele de efuzie, fixate sub un unghi de 15° faţă de orizontală, un manșon de răcire cu azot lichid a celulelor, un tun de electroni rapizi de 3-6 keV pentru studiul suprafeţelor probelor prin difracţia cu electroni rapizi, un ecran fluorescent pentru recepţia electronilor. In faţa orificiului fiecărei celule este situat un obturator mecanic, manevrat fie din exterior, fie de un motor situat în interior. Motorul plasat în interior este un motor cu histerezis de tip Ferranti, tip A-ER 98, degazabil. Frecvenţa de modulare a obturatorului este în domeniul 4-250 Hz, motorul fiind alimentat de la un oscilator de putere AF cu ajutorul căruia i se modifică frecvenţa de modulare. Semnalul de referinţă se obţine utilizând un fototranzistor și o lampă situate de o parte și de alta a obturatorului [5]. Substratul se fixează pe o plăcuţă de molibden fixată la rândul ei pe o bara de inox care culiseaza pe o sanie prin rotirea din exterior. Cu ajutorul acestui sistem de manevră substratul este introdus din camera de pregătire și schimbare a probei în camera de creștere, iar după depunere ete readus în această cameră și prin poarta de schimbare a probei se intervine asupra acesteia. In interiorul camerei de creștere este fixat un cuptor pentru încălzirea substratului.Termocuplul pentru măsurarea temperaturii substratului este confecţionat din W/W-Re și se fixează pe plăcuţa de molibden la distanţa de 1 mm faţă de substrat. Incălzirea substratului se poate face prin convecţie, radiant sau direct. Pentru creșterea compușilor III-V substraturile utilizate sunt monocristale din GaAs sau GaP sub forma de bare cu dimensiunile 20 mm x 2 mm x 1 mm. Celulele de efuzie se pot așeza în poziţie orizontală, în poziţie verticală sau sub un anuit unghi fata de suprafaţa substratului. Avantajul plasării orizontale sau cuasiorizontale (sub un unghi mic) a celulelor este acela că se minimalizează contaminarea materialului conţinut în celula de efuzie prin căderea impurităţilor care au fost depuse în timpul creșterilor anterioare pe obturator sau pe pereţii camerei. Când celulele de efuzie sunt așezate în poziţie verticală, fasciculele moleculare ale diferitelor surse se pot suprapune corespunzător pe suprafaţa substratului, iar în celulele de efuzie se poate introduce mai mult material pentru evaporare (practic se pot umple) faţă de cazul poziţiei orizontale, micșorându-se astfel frecvenţa de reîncărcare a celulelor. Inainte de a fi utilizate celulele, fără materialul de depunere, sunt degazate individual în camera de analiză și preparare la 1500°C timp de 4 ore în condiţii de vid ultraînalt ($<10^{-9}$ Torr).

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

7.5. *Pregătirea substratului.*

Pregătirea suprafeţei substratului pe care are loc creşterea epitaxială este esenţială pentru obţinerea de straturi cu proprietăţi optice si electrice de bună calitate. Suprafaţa substratului trebuie sa fie netedă si curată. Există câteva reţete de preparare a suprafeţei substratului [7,10,11]. Una dintre acestea, care se utilizează în mod uzual pentru pregătirea substratului de GaAs, contine următoarele etape: (a) degazarea cu trichlorethylene, (b) clătirea în methanol, (c) clătirea în jet de apă deionizată, (d) decaparea timp de 10 minute la 60°C în soluţie $H_2SO_4/H_2O_2/H_2O$ (5:1:1), (e) decaparea timp de 5 minute în HCl concentrat, (f) clătirea în apă deionizată. Apoi proba este uscată într-un flux de nitrogen, montată pe plăcuţa de molibden (suport) prin sudura cu indiu la 16°C şi introdusă rapid în camera de transfer a probei din instalaţia de epitaxie. Decaparea probei se poate face şi prin polizarea acesteia cu o hârtie (lens) fără abraziv îmbibată într-o soluţie de Br_2/CH_3OH, în loc de a se folosi soluţie de acid sulfuric. S-a observat că atunci când se utilizează pentru decapare soluţia de acid sulfuric

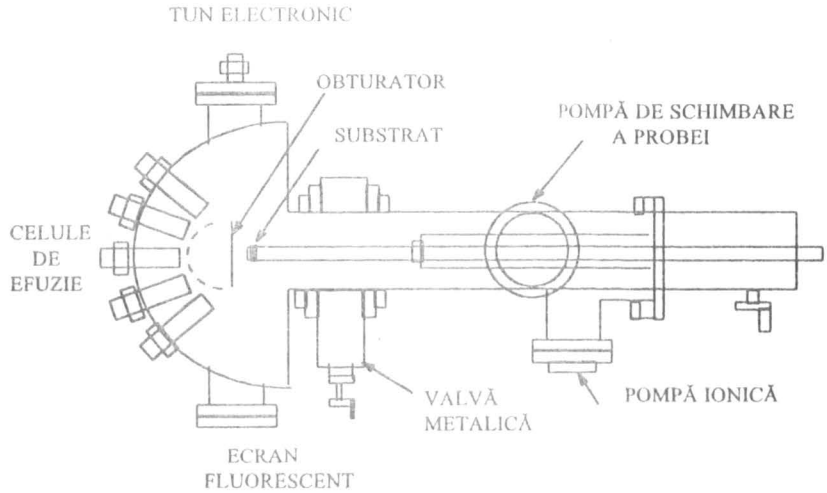


Fig. 7.6

GaAs este îmbogăţit în As, raportul As/Ga pe suprafaţa substratului fiind 1,15 pe când dacă se utilizează soluţia de brominmetanol raportul As/Ga este de 0,7. Iniţial s-a crezut că prin clătirea în apă deionizată suprafaţa substratului se acoperă cu un strat de oxid protector care protejează suprafaţa de contaminări ulterioare. Acest strat de oxid dispare prin desorbţie termică atunci când proba este introdusă în vid ultraînalt. Mai târziu s-a ajuns la concluzia ca nu are loc nici un proces de oxidare în apă deionizată, ci acesta apare în timpul manipulării probei în aer după decapare şi se dezvoltă la încălzire, atunci când se sudeaza proba cu indiu pe suportul de molibden. Dacă fixarea probei pe suport se face mecanic sau sudura cu indiu se efectuează înainte de decapare iar dupa decapare proba se introduce în atmosfera de gaz inert, se evita formarea stratuui de oxid. Dimpotrivă, stratul de oxid poate fi îndepărtat prin

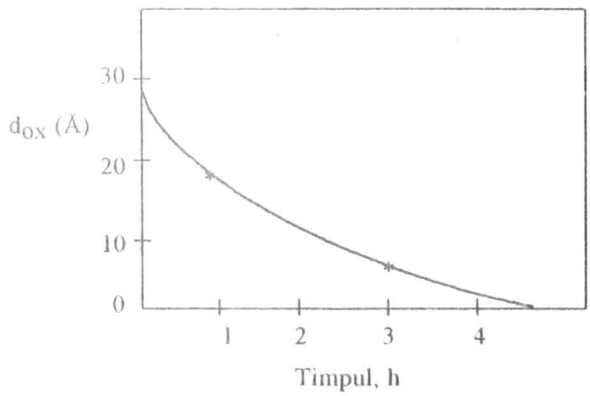


Fig. 7.7

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

dizolvarea acestuia în flux de apă deionizată așa cum se reprezintă în Fig. 7.7 pentru un substrat de GaAs. In această figură în ordonată este reprezentată grosimea stratului de oxid iar în abscisă este reprezentat timpul de dizolvare. Stratul de oxid de pe suprafața substratului poate fi îndepărtat și prin încălzirea lui în camera de crestere, înainte de a se efectua depunerea. Peste o anumită temperatură critică (400°C pentru GaAs si 200°C pentru InP) încălzirea substratului se face în condițiile unei anumite presiuni a elementului din grupa a V-a pentru a se evita descompunerea parțială a suprafeței. Substratul de GaAs se încălzește la temperatura de 525-535°C, temperatură la care se evaporă stratul de oxid existent. Temperatura de 635°C este limita de evaporare, congruentă, a GaAs. Verificarea calității suprafeței substratului înainte de cresterea epitaxială se face utilizând metoda difracției prin reflexia de electroni rapizi și prin spectroscopia de electroni Auger. După fiecare creștere, substratul (împreună cu stratul epitaxial) este deplasat din camera de creștere în camera de schimbare, camera de creștere se izolează de această cameră apoi în camera de schimbare se introduce aer și are loc schimbarea substratului de depunere cu un alt substrat. Apoi se izolează această cameră de mediul înconjurător, se face vid în ea, se deschide valva spre camera de creștere și substratul este adus în poziția necesară depunerii (Fig.7.6). Inainte de depunere intregul sistem este incălzit timp de 14 zile la 180°C cu valvele de izolare închise. In timpul creșterii substratul se rotește pentru a îmbunătăți uniformitatea stratului depus; rata de creștere și viteza de rotire se ajustează astfel ca în timpul unei rotații să se depună un monostrat.

7.6. *Controlul și calibrarea fasciculului molecular.*

In general, controlul fluxului molecular se obține prin controlul temperaturii celulelor de efuzie și monitorizarea fluxului. Pentru măsurarea fluxului molecular se utilizează fie un spectrometru de masă [7], fie o jojă ionică colimatoare [4], sau fluorescența [12]. Pentru calibrarea absoluta a ratelor de depunere se efectuează măsurători electrice si optice după terminarea procesului de creștere a grosimii totale a filmului depus. De asemenea, controlul fluxurilor moleculare se face cu ajutorul obturatoarelor din dreptul fiecărei celule de efuzie. Măsurătorile electrice ale concentrației purtătorilor se fac pe straturi depuse pentru calibrare de 10 μm grosime, folosind geometria van der Paw cu contacte de In și Sn pe GaAs. Rezultatele se corectează ținând cont de deflexia purtătorilor datorită suprafeței și interfeței. Pentru structurile cu gazul de electroni bidimensional se utilizeaza de asmenea pentru măsurători geometria van der Paw și Hall, însa contactele se fac cu Ni/Au/Ge. Când se utilizează pentru măsurarea fluxului un specrometru de masă cuadrupolar, acesta se plasează pe direcția fluxului și i se asociază un selector de semnal de pic de masă care permite măsurarea și compararea simultană a diferitelor fascicule înainte si în timpul creșterii. Spectrometrul se poate cupla direct la dispozitivul de reglare a curentului prin cuptorul celulei de efuzie. Spectrometrul de masă are răspuns rapid și o rezoluție foarte bună astfel că dă posibilitatea unui control al temperaturii și poziției obturatorului in timp real [13]. Se poate controla în acest mod raportul a două fluxuri cum ar fi Al/Ga, Al/In, Ga/In pentru creșterea compușilor $Al_xGa_{1-x}As$, $Al_xIn_{1-x}As$, $Ga_xIn_{1-x}As$. Trebuie observat că sensibiltatea spectrometrului variază semnificativ în timpul funcționării datorita unei deplasări a amplificării; de asemenea, cu un asemenea sistem sunt greu de detectat fluxurile mici ale materialului dopant. O altă dificultate asupra acurateții măsurătorilor apare dacă detectorul spectrometrului si substratul nu sunt așezate în poziții echivalente, datorită dependenței unghiulare a fluxului de

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

particule de nivelul de încărcare cu material a celulei. Când se utilizează pentru măsurarea fluxului o joță de ionizare aceasta se atașează la încălzitorul substratului și se poate roti într-o poziție echivalentă cu cea a substratului in timpul creșterii. Pentru fiecare element există o presiune echivalentă a fluxului care cade pe suprafața substratului. Sensibilitatea jojei variază cu numărul atomic Z al elementului. Pentru fiecare element se definește o eficiență, h, de ionizare în raport cu nitrogenul, pentru care este calibrată joja, care poate fi găsită din următoarea relație empirică [14]

$$\frac{\eta}{\eta_{N2}} = \frac{0,4Z}{14} + 0,6$$

In [15] se dau sensibilitățile jojei de ionizare pentru diverse gaze. Pentru controlul computerizat al celulelor de efuzie este posibil sa se combine controlul temperaturii cu controlul obturatoarelor, realizându-se astfel un control maxim. Diagrama schematică a sistemului de control este reprezentata în fig. 7.8 [16]. Notațiile pe figură sunt după cum urmează: SM-spectrometru de masă, O-obturator, CE-celulă de efuzie, T-termocuplu, XY-inscriptor, G-generator de funcții, M-motor, S-sursă de putere electrică, CM-control motor, CT-control termocuplu, MP-microprocesor, T-terminal, I-inscriptor. Se utilizează un spectometru de masă cuadrupolar de tip QMA 511 ale cărui date sunt înregistrate pe un inscriptor XY. Distanța dintre orificiul celulei de efuzie si joja de ionizare a spectrometrului de masă este de 62 mm. Pentru celula de efuzie cu Ga curentul de încălzire este de 11A și puterea de 140 W. Programul de control al computerului folosit poate fi scris în sistemul BASIC și folosește un algoritm proporțional-integro-diferențial [17,18]

$$E(k)=E(k-1)+A_0e(k)+A_1e(k-1)+A_2e(k-2)$$

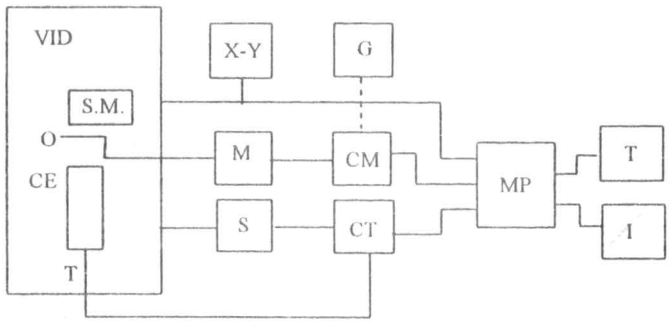


Fig. 7.8

unde e(k) este diferența dintre rata măsurată și rata dorită la cel de al k-lea interval și E(k) este semnalul de corecție generat. Constantele din această ecuație sunt date de expresiile

$$A_o = K_p(1+\frac{\tau}{\tau_i}+\frac{\tau_d}{\tau});\ A_1 = -K_p(1+\frac{2\tau_d}{\tau});\quad A_2 = K_p\frac{\tau_d}{\tau}$$

unde K_p este proporțională cu amplificarea întregului circuit, τ_i este timpul integrat, τ_d este timpul derivat, și τ este perioada de măsură. Algoritmul de mai sus se obține din ecuația proportională-integro-diferențială continuă în timp [19]

$$E(t)=K_pe(t)+\frac{1}{\tau_i}\int e(t)dt+\tau_d\frac{de(t)}{dt}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Parametrii K_p,τ_i și τ_d sunt ajustați astfel ca să permită un control stabil al surselor de evaporare. Factorii care determină această ajustare sunt tipul de sursă utilizată, materialul pentru evaporat și rata dorită de evaporare. Parametrii optimi se determină din observarea tensiunii de control a sursei când computerul execută o variație de o treaptă în rata de evaporare. Parametrii optimi sunt cei care execută variația în intervalul de timp cel mai scurt, cu deviații minime și fără a se produce intrarea în oscilație a tensiunii de control. In timpul evaporării computerul îndeplinește câteva funcții diferite. Există trei segmente de control. In timpul primului segment puterea electrică a sursei crește ușor pâna la un nivel predeterminat. Aceasta încălzește materialul de evaporat și permite acestuia sa iasă prin orificiul celulei într-un mod controlat evitându-se astfel o deviatie mare a presiunii. Al doilea segment menține puterea sursei la acest nivel un anumit timp si rata de evaporare devine stabilă. Din acest punct computerul comută pe așanumitul "mod de lucru de rată. În care timp controlează rata de evaporare cu monitorul de rată și algoritmul de mai sus. In acest proces temperatura celulei de efuzie este controlata prin reacția termocuplului din partea unui sistem de control proporțională cu rata de depunere.

7.7. *Cinetica procesului de creștere epitaxială.*

Creșterea prin epitaxie cu fascicule moleculare este controlată de către cinetică, spre deosebire de creșterea prin epitaxie din fază lichidă sau din fază gazoasă care au loc în condiții de cuasiechilibru. Studiul cineticii de creștere a straturilor prin epitaxie cu fascicule moleculare s-a efectuat utilizând tehnica răspunsului tranzitoriu prin modularea fasciculelor moleculare [20-22]. S-a demonstrat prin această metodă că formarea straturilor subțiri din compuși III-V din fasciculele elementelor este controlată cinetic prin absorbția elementului din grupa a V-a, pe când rata de creștere este determinată numai de către fluxul elementului din grupa a III-a. Fasciculele moleculare ale elementelor din grupa a III-a se deosebesc de fasciculele moleculare ale elementelor din grupa a V-a. Galiul este totdeauna monoatomic pe când fluxul de arseniu poate să aiba molecule fie de As_2, fie de As_4. Tetramerul se obține atunci când arseniul se evaporă din celula separată pe când dimerul se obține atunci când are loc evaporarea compusului III-V din aceeași celulă. Analog cu As se comportă P și Sb. Pentru a obține starea de dimer atunci când As se evaporă din celulă separată se utilizează o celulă Knudsen cu două zone [23]. Prima zonă este cea convențională și produce fasciculul de As_4 pe când cea de a doua zona este menținuta la o temperatura mai mare astfel încât prin coliziunea moleculelor de As4 de suprafața încălzită să se producă As_2. Raportul de conversie este de 99,99%. S-a observat că în domeniul uzual de temperatură (500-600°C) în care are loc creșterea GaAs, coeficientul de alipire al

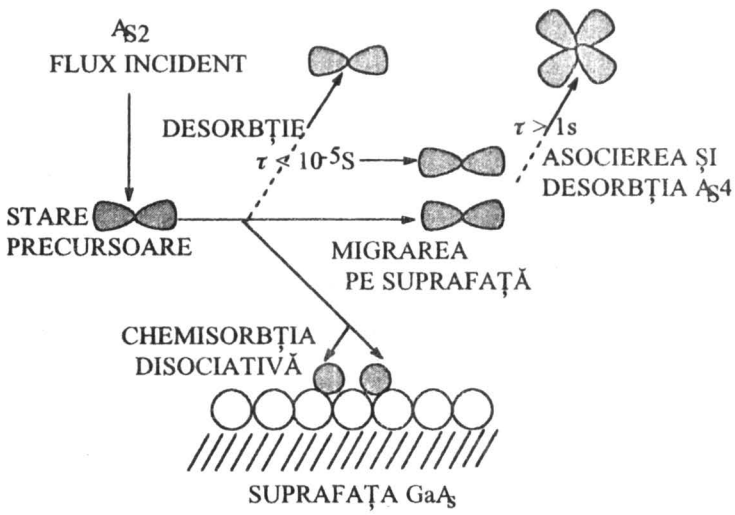


Fig. 7.9

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

galiului este egal cu unitatea, în timp ce coeficientul de alipire al As_2 depinde de conţinutul de Ga al suprafeţei pe care cade deoarece As_2 rămâne pe suprafaţă numai atunci când poate să realizeze legături chimice cu Ga. De exemplu dacă există un substrat monoatomic de atomi de Ga, coeficientul de alipire al As_2 este egal cu unitatea. De asemenea, coeficientul de alipire al As_2 pe substratul de GaAs creşte cu rata de adsorbţie a Ga, atingând valoarea unitate atunci când fluxul de Ga este aproximativ de 2 ori fluxul de As_2. Deci pentru obţinerea GaAs în compoziţie stoichiometrică este necesar ca raportul celor doua fluxuri să satisfacă inegalitatea $F_{As2}/F_{ga}>0,5$, excesul de molecule de As_2 eliminându-se simplu prin desorbţie. In realitate, datorită disocierii parţiale a GaA în domeniul temperaturilor de creştere, prin evaporarea As_2 de pe substrat, pentru compensarea acestuia se utilizeaza un raport $F_{As2}/F_{ga}>1$. Creşterea GaAs din fascicule moleculare de Ga si As_2 este reprezentată în fig. 7.9. In acord cu acest model moleculele de As_2 sunt absorbite întâi într-o stare precursoare de legătură slabă, mobilă. Disocierea moleculelor de As_2 adsorbite şi fixarea lor pe suprafaţă are loc numai atunci când acestea întâlnesc perechi de noduri de reţea ocupate cu Ga, în timpul migrării acestora pe suprafaţă. Coeficientul de adsorbţie al As_2 creşte liniar cu rata de adsorbţie a Ga atingând valoarea egală cu unitatea atunci când $F_{Ga}=2F_{As2}$, adică GaAs stoichiometric se formează în condiţiiole $G_{Ga}<2F_{As2}$, orice exces de As_2 fiind eliminat prin desorbţie. Dacă moleculele de As_2 nu întâlnesc un anumit timp atomi de Ga ele părăsesc suprafaţa sub formă de molecule dimere (As_2) sau tetramere (As_4). La o temperatură a substratului mai mică decât 330°C are loc asocierea moleculelor de As_2 adsorbite formându-se molecule de As_4 care părăsesc suprafaţa. Rata de desorbţie a As4 are un maxim la ~180°C. In aceste discuţii ne referim la o suprafaţă orientată (100) a substratului de GaAs deoarece aceasta suprafaţă este polara şi poate fi terminată fie în atomi de Ga, fie în atomi de As sau o combinaţie de ambii atomi. Procesul de crestere atunci când As este sub forma de flux As_4 este mai complex. Fluxurile de Ga si As_4 interacţionează pe suprafaţa GaAs, raportul relativ al celor două fluxuri influenţând puternic coeficientul de alipire al As_4. Pentru $F_{Ga}<<F_{As4}$, coeficientul de alipire al As_4 este egal cu raportul $F_{As4}/4F_{Ga}$; în acest caz se creşte GaAs în compoziţie stoichiometrică. In cazul când $F_{Ga}\leq F_{As4}$ coeficientul de alipire al As_4 devine independent de F_{ga}, dar nu depăşeşte niciodată valoarea 0,5. Modelul mecanismului de creştere a GaAs din flux de Ga si flux de As_4 este reprezentat în Fig. 7.10. Proprietatea critică este disocierea în perechi a moleculelor de As_4 adsorbite de atomi de Ga adiacenţi. Din oricare două molecule de As_4, patru atomi de As sunt încorporaţi în reţeaua de GaAs iar ceilalţi patru sunt desorbiţi ca o moleculă de As_4. Acest rezultat este în acord cu relaţia $s_{As4}=F_{As4}/4F_{Ga}$ când $F_{Ga}<<F_{As4}$, adică atunci când densitatea de atomi de Ga pe suprafaţă este mică, şi $s_{As4}=0,5$ când densitatea de atomi de Ga pe suprafaţă este mare. S-a observat experimental că coeficientul de alipire al elementelor din grupa a V-a creşte de-a lungul coloanei de la P la Sb. Introducerea impurităţilor de dopare se face utilizând celule de efuzie

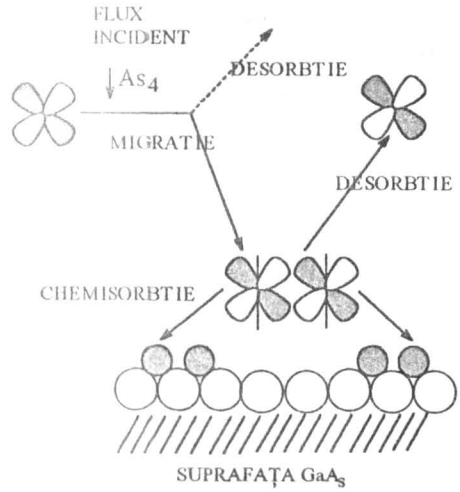


Fig. 7.10

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

separate care contin elementul de dopare. Toate elementele, cu excepţia Zn, utilizate ca dopant pentru GaAs crescut prin epitaxia cu fascicule moleculare au coeficientul de alipire (aderenţă) egal cu unitatea.

7.8. *Difracţia de electroni rapizi prin reflexie.*

Difracţia de electroni de energie mare este foarte sensibilă cu morfologia suprafeţei, figurile de difracţie indicând prezenţa neuniformităţilor (asperităţilor) microscopice, răsucirilor şi muchiilor orientate înclinat pe o suprafaţă plană. Difracţia electronilor rapizi prin reflexie este cea mai importantă şi poate cea mai eficace metodă de control al creşterii prin epitaxie cu fascicule moleculare. Electronii accelerati sub acţiunea unei diferenţe de potenţial U, au lungimea de undă de Broglie asociată dată de relaţia

$$\lambda = \sqrt{\frac{1,5}{U}} \text{ nm ; U se exprimă în V.}$$

Pentru analiza figurilor de difracţie ne imaginăm cristalul ca un set de plane net paralele în care sunt localizaţi atomii. Notând cu d distanţa dintre aceste plane, cu q unghiul de incidenţă al fasciculului de electroni, scriem relaţia lui Bragg

$$2d\sin\theta = n\lambda$$

Dacă tensiunea de accelerare variază de la 3 la 100 keV lungimea de undă variază de la 0,022 nm la 0,004 nm. Asemenea lungimi de undă sunt mai mici decât distanţele interplanare cristaline, rezultând unghiuri Bragg de la o fractiune de grad la câteva grade. In comparatie cu razele X si cu neutronii, care se utilizează de asemenea pentru examinarea materialelor prin difracţie, electronii posedă proprietatea importantă că pot fi focalizaţi şi deflectati în câmp electric sau magnetic. Experienţele de difracţie cu electroni se pot realiza uşor cu fascicule bine colimate care pot fi focalizate pe ecrane de observaţie sau pe plăci fotografice. O altă consecinţă a faptului că electronul are sarcină este aceea că secţiunea eficace de împrăştiere a electronilor este cu câteva ordine de mărime mai mare decât cea a razelor X sau neutronilor, permiţând să se obţină figuri de difracţie de la straturi destul de subţiri, nm sau mai mici. Electronii de energie mare sunt deflectaţi de către câmpul Coulomb al atomului. Câmpul intens din apropierea nucleului produce o deflexie mare în timp ce împrăştierea la unghiuri mici depinde de câmpul rezultant dat de de sarcina nucleului ecranată de către electronii atomului.

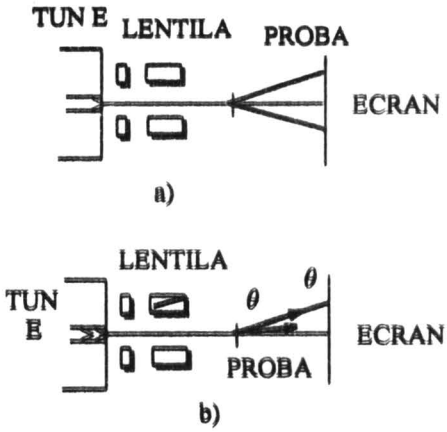


Fig. 7.11

Intensitatea electronilor împrăştiati de către un atom într-un unghi solid constant este proporţională cu pătratul amplitudinii de împrăştiere. In cazul difracţiei electronilor de energie mare intensitatea descreşte rapid cu unghiul de deflexie 2θ sau, mai precis,cu parametrul de împrăştiere $2\sin\theta/\lambda$. Schema instalaţiei de difracţie de electroni prin transmisie

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

este reprezentată în Fig. 7.11 a iar prin reflexie este reprezentată în Fig. 7.11 b. Electronii emiși de către un filament, aflat la potențial negativ de valoare mare,în vid de 10^{-4}Torr sau mai bun, sunt accelerați de catre un anod aflat la potențialul pământului. Cu ajutorul unor lentile electrostatice sau magnetice și a unor aperturi, fasciculul de electroni este bine colimat, ceea permite să fie focalizat pe un ecran fluorescent sau o placă fotografică. O probă sub formă de strat subțire este plasata în calea fasciculului la o distanță L de ecran. Difracția fasciculului poate avea loc într-un unghi de difracție 2θ, astfel că fasciculul difractat cade pe ecran la o distanță R de localizarea spotului dat de catre fasciculul nedifractat. Unghiul de deflexie se găsește din relația R/L=tan2θ. La lungimile de undă mici utilizate în difracția de electroni de energie mare, θ este mic astfel că se poate aproxima tanθ≈sinθ≈θ și planele de difracție sunt aproape paralele cu fasciculul incident. In Fig. 7.11 b este reprezentată difracția electronilor de mare energie prin reflexie, în care caz fasciculul de electronicade razant pe probă și fasciculul reflectat de către suprafață formează o figură de difracție pe ecran. In cele mai multe cazuri această figură de difracție apare din penetrația fasciculului prin asperitățile suprafeței și este similară cu o figură de transmisie. O asemenea figură de difracție este reprezentată în Fig. 7.12 a.

In cazul când suprafața este atomic plată apare o figură cu totul diferită, așa cum se reprezintă în fig. 7.12 b. Interpretarea figurilor de difracție de electroni de energie mare, obținute pe ecranul fluorescent este reprezentată în Fig. 7.13 [24]. Notând cu d distanța dintre planele cristaline se poate scrie d=2λL/D, unde L este distanța dintre substrat si ecranul fluorescent și D este dublul distanței dintre spoturile de difracție, măsurată pe ecranul fluorescent. Prin urmare, măsurând distanța dintre spoturi se poate deduce periodicitatea rețelei. Pentru L egal cu 30,5 cm, lungimea de undă a electronilor cu energia de 5 keV, λ=0,0173 nm, se obține pentru Ga As cu suprafața orientată după (110) în care caz distanța dintre plane, d_{110}=0,4 nm, o distanță dintre spoturi egală cu 1,35 cm. In sistemele de epitaxie cu fascicule moleculare un fascicul de electroni monoenergetici, bine colimat, este incident razant, sub un unghi de aproximativ 1°, pe suprafața substratului care este ortogonală pe fasciculul molecular. Adâncimea de penetrație a fluxului de electroni incident este limitată la primele câteva straturi atomice ale cristalului deoarece componenta normală a energiei pe suprafață este de ordinul a 30-150 eV chiar dacă energia totala a fasciculului este de 1-50 keV. Acest fenomen apare deoarece probabilitatea de împrăștiere inelastică este foarte mare pentru electronii cu energia în domeniul 50-150 eV, astfel că numai acei electroni care au fost împrăștiați elastic foarte aproape de suprafață sunt capabili sa scape fără pierdere de energie. O suprafață cristalină plană actionează astfel ca o rețea bidimensională și difractă electronii sub formă de fascicule discrete care formează o figură de difractie pe ecranul fluorescent așezat perpendicular pe suprafața de difracție. Această dispunere a ecranului permite studiul suprafeței prin difracție cu electroni și în timpul creșterii. Simetria și spațierea rețelei reciproce pot fi determinate foarte ușor din figura de difracție. Pentru a obține întreaga simetrie de translație a suprafeței se înregistreaza doua sau

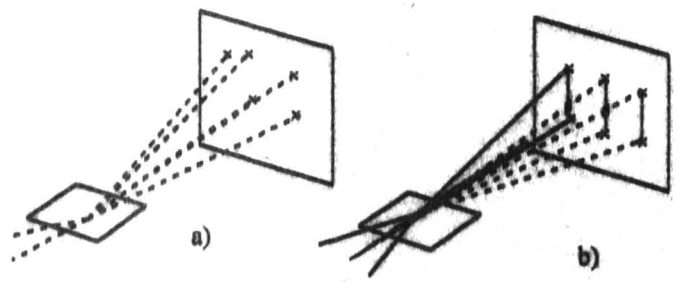


Fig. 7.12

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

mai multe figuri de difracţie. Se pot obţine, de asemenea, informaţii asupra topologiei suprafeţei. O suprafaţă monocristalină netedă da o figură de difracţie sub forma de linii (Fig. 7.12 b) care sunt orientate într-o direcţie perpendiculară pe suprafaţa studiată. Dacă suprafaţa nu este perfect netedă apare un spectru de puncte ca în Fig. 7.12 a, datorita asperităţilor. In general, suprafaţa substratului înainte de depunere chiar dacă a fost decapată chimic prezinta asperităţi si spectrul de difracţie se prezintă ca în Fig. 7.12 a. După depunerea a câtorva zeci de nm de GaAs prin epitaxie cu fascicule moleculare spectrul de difracţie devine sub formă de linii, indicând o planeitate perfecta a stratului depus.

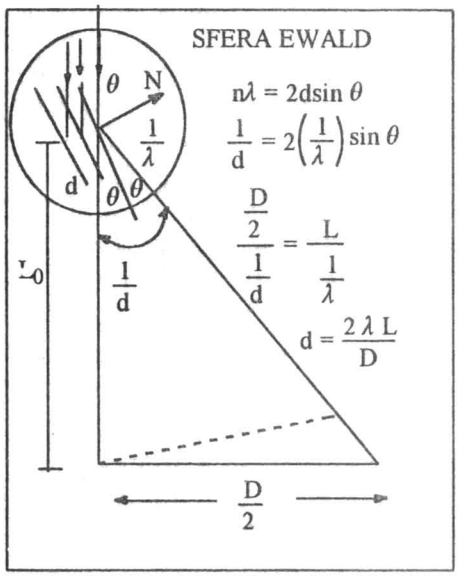


Fig. 7.13

Problema esenţială este cea a reconstrucţiei suprafeţei pe baza figurilor de difracţie. Pentru caracterizarea suprafeţelor se foloseşte o convenţie propusă de Wood [25] pentru reconstrucţia acestora şi anume reconstrucţia m×n care semnifică faptul că cei doi vectori primitivi ai suprafeţei sunt de m si, respectiv, n ori mai mari decât vectorii analogi din planul din interiorul volumului, adică pe suprafaţă o celula unitate este de m×n ori mai mare decât cea dintr-un strat echivalent din volumul suport. Structurile care apar oportun în cazul creşterii straturilor subţiri din GaAs sunt GaAs(100)-C(2×8) şi GaAs(100)-C(8×2) precum si (2×4) şi (4×2). Indicele C indică celulă unitate centrată. Pentru suprafaţa (001) cei doi vectori sunt orientaţi în direcţiile $[1\bar{1}0]$ şI, respectiv, $[\bar{1}\bar{1}0]$.

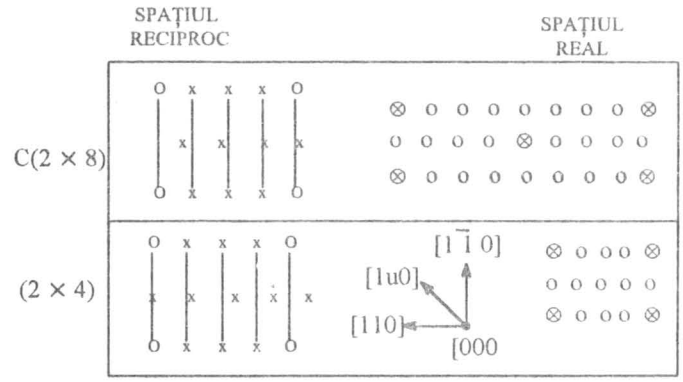


Fig. 7.14

Din studiile de difracţie prin reflexia electronilor rapizi s-a observat o succesiune a diferitelor structuri ale suprafeţei depinzând de temperatura substratului şi de raportul fasciculelor Ga/As_2. Pentru o anumita valoare a acestui raport s-a observat o tranziţie de la starea C(2×8),. stabilizată în As. la starea C(8×2),. stabilizată în Ga., prin încălzirea substratului. In starea C(2×8) periodicitatea dublă a suprafeţei este în direcţia legăturilor de As, pe când în starea C(8×2) este în direcţia legăturilor de Ga. Tranziţia structurală de la suprafaţa C(2×8), stabilizată în As, la suprafaţa C(8×2) stabilizată în Ga, este acompaniată de o desorbţie a moleculelor de As_2 nefiind observată o desorbţie a moleculelor de Ga. Structura C(2×8) apare atunci când raportul fluxurilor As_4/Ga este mai mare decât 0,5, iar structura C(8×2) apare pentru raportul fluxurilor apropae de 0,5 sau prin încălzirea structurii C(2×8) la o temperatură mai mare de 550°C. Reprezentarea reţelei reciproce si a celei în spaţiul real a unei suprafeţe

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

C(2×8) și a unei suprafețe C(2×4) este arătată în Fig. 7.14. Cerculețele goale reprezinta periodicitatea de volum iar cruciulițele reprezintă periodici-tatea superrețelei depuse. De exemplu, structura rețelei reciproce C(2×8) se obține din observarea a două figuri de difracție pentru suprafața (001) și anume după azimutul $[\bar{1}\,\bar{1}\,0]$ șI, respectiv $[1\,\bar{1}\,0]$. Aceste două figuri de difracție sunt reprezentate în Fig. 7.15 a și b. Ambele figuri de difractie prezintă linii separate între ele prin distanțe proportionale cu inversele distanțelor interatomice din volum.

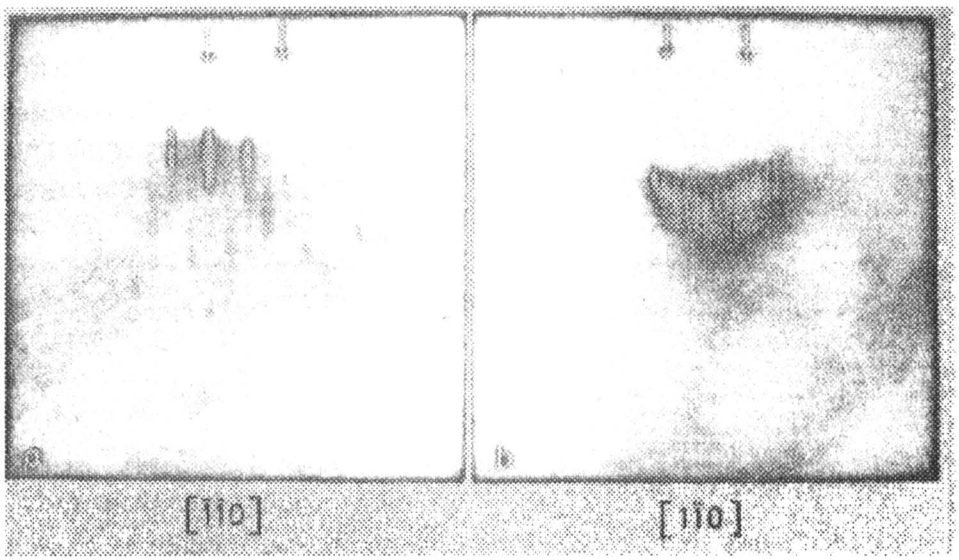


Fig. 7.15

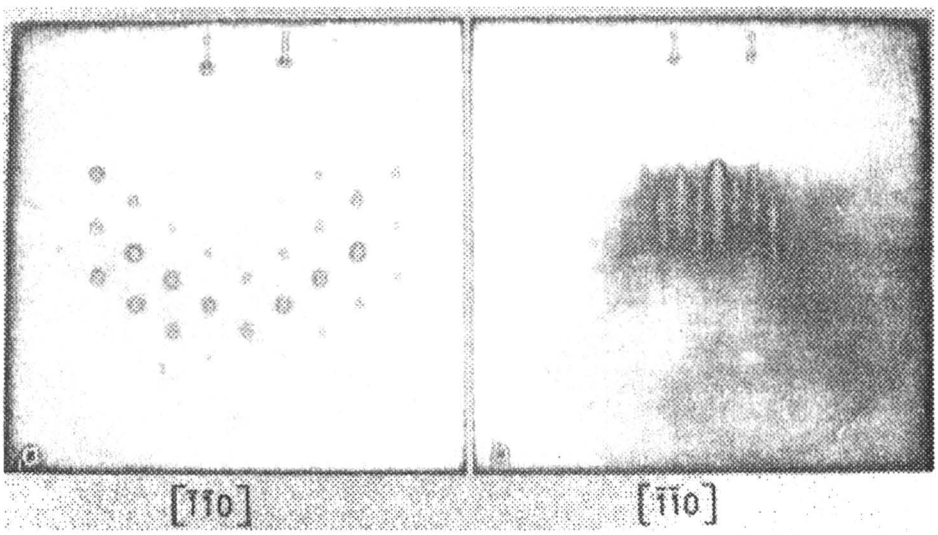


Fig. 7.16

Pe figură este reprezentată prin săgeți poziția spoturilor de difracție corespunzătoare distanțelor interatomice. O asemenea poziție se găsește obținând pe ecran figura de difracție a suprafeței substratului înainte de depunere. Aceasta se prezintă sub formă de spoturi ca in Fig. 7.16 a. Spațiul reciproc construit în Fig. 7.11 este normal pe planul figurii si pe azimutul

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

respectiv. Figura de difracţie din Fig. 7.15 a obţinuta în direcţia $[\bar{1}\,\bar{1}\,0]$ prezintă linii de ordinul 1/2 iar cea din Figura 7.15 b, în direcţia $[1\,\bar{1}\,0]$ prezintă linii de ordinul 1/8 (adică distanţate la 1/8 din distanţa din figura de difracţie de volum din Fig. 7.16 a) ceea ce indică în suprafaţa reconstruită o structură cu spaţierea de 2 si, respectiv, 8 ori mai mare decât în volum. Notăm că structurii centrate C(2×8) , stabilizată cu As, îi corespunde una analoagă, necentrată, (2×4) iar structurii centrate C(8×2), stabilizata cu Ga, îi corespunde una analoagă ca spectru de difracţie, necentrată (4×2). Din studiul difracţiei de electroni este imposibil să se distingă între structurile C(2×8) şi (2×4) sau structurile C(8×2) şi (4×2). De aceea mulţi autori se referă numai la structuri (2×4) sau (4×2) ceea ce nu însemneaza ca structurile depuse nu pot fi şi centrate. O altă observaţie este că figurile de difracţie pentru C(8×2) şi (4×2) arata la fel ca pentru C(2×8) şi (2×4) cu cele două azimuturi [110] interschimbate între ele. Aceasta arată că în spatiul real cele doua structuri se transforma una în cealaltă printr-o rotatie de 90°. Figurile de difracţie obţinute după azimutul cu spaţiere dublă au linii mai lungi şi de intensitate mai slabă în comparaţie cu liniile de difracţie dupa azimutul care da o spatiere de 8 ori mai mare decât in volum.

Bibliografie

1. K.G.Gunther, Z.Naturforsch. 130,1081 (1958).
2. M.Knudsen, The Kinetic Theory of Gases, Methue, London, 1934.
3. P. E. Luscher, D.M.Collins, în "Molecular beam epitaxy. Pergamon Press, 1980.
4. K. Ploog, Crystals, 3, 73 (1980).
5. C. T. Foxon, M. R. Boudry, B. A. Joice, Surf. Sci. 44, 69 (1974).
6. C. T. Foxon, Acta Electronica, 16, 323 (1973).
7. A. Y. Cho, J. R. Arthur, Prog. Solid State Chem. 10, 157 (1975).
8. D. L. Smith. V. Y. Pickhardt, J. Appl. Phys. 46, 2366 (1975).
9. H. Roulet, K. Alexandre, J. Vac. Sci. technol. 19, 253 (1981).
10. A. Y. Cho, Thin solid films, 100, 291 (1983).
11. D. Bounevie, D. Huet, J. Phys. (Paris) 43, C 5-445 (1982).
12. A. C. Gossard, Thin solid films, 57, 3 (1979).
13. P. Etienne, J. Massies, N. linh, J. Phys. E, 10, 153 (1977).
14. C. R. Wood, D. Desimone, K.Singer,G.Wicks, J. Appl. Phys. 53, 4230 (1982).
15. T. Flaim, P.Ownley, J. Vac. Sci. Technol. 8, 661 (1971).
16. A. Beck, H. Jungen, B. Bullemar, I. Eisele, J. Vac. Sci. Techno l. A 2, 5 (1984).
17. C. Pomeranski, Rev. Sci. Instrum. 48, 1421 (1977).
18. R. J. Wess, A. M. Goldman, J. Vac. Sci. Technol. A 3, 1907 (1985).
19. Y. Taxahashi et al, în Control and dynamic systems, Addison, Welley, 1978.
20. J. Arthur, J. Appl. Phys. 39, 4032 (1968).
21. C. T. Foxon, B. Joice, Current topics in material science, vol. 7, North-Holland Publishing Company, 1981.
22. B. Joice în Molecular beam epitaxy and heterostructures, NATO ASI series, 1985.
23. J. Neave, P. Blood, B. joice, Appl. Phys. Lett. 36, 311 (1980).
24. A. Y. Cho in Molecular beam epitaxy and heterostructures, NATO ASI series, 1985.
25. E. A. Wood, J. Appl. Phys. 35, 1306 (1964).

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Capitolul VIII

Epitaxia din fază de vapori din compuși organometalici.

Epitaxia din fază de vapori (din compuși) organometalici (EFVOM) denumită în literatura străină "organometallic vapor phase epitaxy. (OMVPE) sau . metalorganic chemical vapor deposition.(MOCVD) a devenit una din tehnicile principale de creștere a straturilor subțiri epitaxiale de înaltă puritate și a heterojoncțiunilor din GaAs,AlGaAs,InGaAsP și AlInAsP [1, 2]. In EFVOM unul sau mai mulți constituienți ai stratului subțire este transportat ca substanță organimetalică în fază gazoasă către suprafața de creștere, care se menține la o temperatură ridicată. Utilizarea compușilor organometalici asigură o flexibilitate a procesului de creștere, însă acesta devine o funcție mai complicată de procesele de transport si reacțiile de la suprafață.

8.1. *Procesele fundamentale.*

Natura reacțiilor care au loc in cazul creșterii epitaxiale a straturilor subțiri prin EFVOM este în parte determinata de dinamica gazului, adică de profilurile vitezei si temperaturii în vecinătatea zonei de depunere care determină gradienții de concentrație si temperatură. De asemenea, reacțiile sunt puternic influențate de precursorii chimici utilizați. In acest paragraf vom prezenta tipuri de substanțe precursoare, reacțiile care au loc si dinamica gazului.

8.1.1. Substanțe precursoare

Ca substanțe precursoare pentru creșterea compușilor III-V se utilizeaza alkyli ai metalelor din grupa a III-a și hibrizi ai elementelor din grupa a V-a. De exemplu, formarea GaAs este descrisa de ecuația

$$(CH_3)_3Ga + AsH_3 \rightarrow GaAs + 3CH_4 \qquad (1.1)$$

In unele cazuri, în locul hibrizilor pentru elementele din grupa a V-a se utilizează de asemenea alkyli. Ca surse dopante de tip n se utilizează hibrizi sau alkyli ai elementelor din grupele a IV-a și a VI-a. Ca dopanți de tip p se utilizeaza alkyli ai elementelor din grupa a II-a.Ecuația (1.1) poate fi generalizată pentru compușii III-V sub forma

$$R_3M+EH_3 \rightarrow ME+3RH \qquad (1.2)$$

unde M=Al, Ga sau In, R=CH_3 sau C_2H_5,E=P, As sau Sb. Aceasta este o formă simplificată a reacției de formare a compușilor, care nu ia în considerare etapele intermediare care pot avea loc. Acestea vor fi prezentate în detaliu într-un paragraf următor dedicat cineticii de creștere. Dacă au loc mai multe reacții de tipul (1.2) simultan, solidul rezultant este un aliaj mixt de

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

tipul $M_{1-x}M_xE$ (de exemplu, $Ga_{1-x}In_xAs$). Compoziția x este determinată de ratele relative ale celor doua reacții care depind de un număr de factori ca difuzia gazului, treptele intermediare ale reacției, etc. In Tabela 8.1 se prezintă alkyli utilizați în mod uzual la creșterea straturilor epitaxiale prin EFVOM. Toți alkylii elementelor din grupa a III-a sunt piroforici și reactioneaza puternic în contact cu aerul sau apa. Alkylii sunt în stare lichidă incoloră, la temperatura camerei, cu excepția TMIn și Cp_2Mg care sunt în stare solidă și au culoarea albă. In fază de vapori alkylii sunt monomeri cu excepția TMAl care este dimer. Deoarece reacționează puternic cu oxigenul, alkylii trebuie menținuți în atmosferă de gaz inert sau în vid.

Tabela 8.1

Compusul	Formula	Abrevierea	Punctul de topire,°C	Punctul de fierbere °C
Surse pentru grupa a II-a				
Diethylberylium	$(C_2H_5)_2Be$	DeBE	12	194
Dimethylberylium	$(CH_3)_2Be$ DMBe			
Biscyclopentadienylmagnesium	$(C_5H_5)Mg$	Cp_2Mg	176	
Surse pentru grupa a II-a B				
Dimethylzinc	$(CH_3)_2Zn$	DMZn	-42	46
Diethilzinc	$(C_2H_5)_2Zn$	DeZn	-28	118
Dimethilcadmium	$(CH_3)_2Cd$	MMCd	-4,5	105,5
Surse pentru gr. a III-a				
Trimethyl aluminium	$(CH_3)_3Al$	TMAl	15,4	126
Triethylaluminium	$(C_2H_5)_3Al$	TEAl	-58	194
Trimethylgallium	$(CH_3)_3Ga$	TMGa	-15,8	55,7
Triethylgallium	$(C_2H_5)_3Ga$	TEGa	-82,3	143
Trimethylindium	$(CH_3)_3In$	TMIn	88,4	133,8
Triethylindium	$(C_2H_5)_3In$	TEIn	-32	184
Surse pentru gr. a IV-a				
Tetramethylgermanium	$(CH_3)_4Ge$	TMGe	-88	43,6
Tetramethylstaniu	$(CH_3)_4Sn$	TMSn	-53	78
Tetraethylstaniu	$(C_2H_5)_4Sn$	TESn	-112	180
Surse pentru gr. a V-a				
Trimethylphosphorus	$(CH_3)_3P$	TMP	-85	37,8
Triethylphosphorus	$(C_2H_5)_3P$	TEP	-88	127
Trimethylarsenic	$(CH_3)_3As$	TMAs	-87,3	50-52
Triethylarsenic	$(C_2H_5)_3As$	TEAs	-91	140
Trimethylantimony	$(CH_3)_3Sb$	TMSb	-86,7	80,6
Triethylantimony	$(C_2H_5)_3Sb$	TESb	-98 116	
Surse pentru gr. a VI-a				
Diethylselenide	$(C_2H_5)_2Se$	DESe	108	
Dimethyltellurium	$(CH_3)_2Te$	DMTe	-10	82
Diethyltellurium	$(C_2H_5)_2Te$	DETe	137-138	

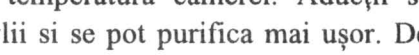
https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

8.1.2. Reacțiile în faza gazoasă.

Atunci când se utilizează alkyli pentru grupaa II-a și hibrizi pentru grupa a V-a apar reacţii între cele două substanţe în gazul rece în timpul transportului către zona caldă de creștere. Inaintea reacţiei (1.2) poate avea loc reacţia

$$R_3M+EH_3 \rightarrow R_3M\text{-}EH_3 \qquad (1.3)$$

Tăria legăturii ME este o măsură a stabilităţii substanţei complexe. Pot fi posibile 4 cazuri: (a) să nu aibă loc nici o reacţie, (b) să se formeze un compus volatil, (c) să se formeze un compus nevolatil, (d) dezvoltarea unor reacţii adiţionale care produc compuși nevolatili. Cazurile a si b sunt triviale deoarece transportul vaporilor are loc în continuare. Atunci când se formează produse nevolatile (cazurile c si d) gazul transportor poate fi golit de unul sau mai mulţi reactanţi ceea ce determină o micșorare a ratei de creștere sau o modificare a compoziţiei aliajului care se crește. Astfel se întâmplă în cazul reacţiei dintre TEIn și AsH_3. La concentraţii relativ mici ($\leq 10^{-4}$ fracţiune molară) și viteze mari ale gazului, utilizate într-un reactor EFVOM, aceste reacţii au loc numai în câteva procente înainte ca reactanţii sa ajungă în zona de piroliză. Desfășurarea unei anumite reacţii depinde de geometria specifică a reactorului. Intre alkylii din gr. a III-a și alkylii din gr. a V-a se pot forma aducţi în acord cu reacţia



$$R_3M+R_3'E=R_3MER_3' \qquad (1.4)$$

Alkylii din grupa a III-a acţionează ca acizi Lewis puternici iar alkylii din gr. a V-a actionează ca baze Lewis. Deoarece alkylii din gr. a V-a sunt în general baze Lewis mai puternice decât hibrizii corespunzători se pot utiliza pentru a obţine aducţi stabili pentru a inhiba reacţia (d) care are loc între alkylii din gr. a III-a și hibrizii din gr. a V-a. Aducţii au o presiune de vapori mult mai mică decât oricare din componentele individuale și tind să devină substanţe în stare solidă la temperatura camerei. Aducţii sunt mai puţin piroforici, se păstreaza mai ușor decât alkylii si se pot purifica mai ușor. Deoarece aducţii sunt substanţe solide cu presiune joasă de vapori se iau măsuri pentru evitarea condensării în interiorul reactorului:valve încălzite si alte echipamente.

8.1.3. Dinamica transportului substanţelor.

Un mare rol în procesul de creștere îl joacă gradienţii vitezelor si temperaturii gazului în vecinătatea suportului ce susţine substratul pe care are loc depunerea. Transportul alkylilor către interfaţa de creștere are loc în special prin difuzie pe deasupra zonei de la frontiera cu substratul. Modelarea procesului de creștere necesită corelarea ratei de creștere, uniformităţii compoziţiei si profilului interfeţei cu condiţiile de lucru (presiune, temperatură, concentraţiile reactantilor) si cu geometria reactorului. Ban [3] a măsurat gradienţii de temperatură și de concentraţie și a găsit dienţi in treaptă de concentraţie si temperatură. Gazul este cald, mai vâscos și transportul este aproape laminar. Deasupra acestei zone se află cea de a doua zonă, în care gradienţii sunt relativ mici, însă sunt prezente oscilaţii la 3-5 Hz , ceea ce indică existenţa unei turbulenţe. Turbulenţa este cauzată atât de efectele de pătrundere termică cât și

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

de forţele de plutire care îşi au originea la frontiera din faţă a suportului (care este cald). Această turbulenţă, indusă termic, este diferită de turbulenţa datorată discontinuităţii geometrice, a îngustării canalului începând de la la frontiera din faţă a suportului. Această din urmă turbulenţă poate fi eliminată prin introducerea în faţa suportului a unor tubuleţe din cuarţ. Efectele de pătrundere termică se extind pe distanţa L =0,4d(Pr)/(Re) unde d este înălţimea canalului iar Pr şi Re sunt numerele lui reactori nu Prandtl şI, respectiv Reynolds [2]. Numărul lui Prandtl este egal cu raportul dintre difuzivitatea impulsului şi difuzivitatea termică şi are valoarea tipică în jur de 0,7. Numărul lui Reynolds este egal cu raportul dintre fluxul impulsului prin convecţie şi fluxul impulsului prin difuzie si are valoarea între 0,1 şi 100. Pentru geometria şi condiţiile de funcţionare ale unui reactor orizontal, L este de ordinul 10-50 cm. Deoarece lungimea substratului este în jur de 10-20 cm, rezultă ca cei mai mulţi functionează cu întreg profilul de transport pe aria de depunere. In spaţiul confinat deasupra suportului se dezvoltă, totuşi, un strat (de gaz) limitat la frontierele acestuia. In modelul teoretic al lui Beckman et al [4] se consideră zona superioară, turbulentă, ca un strat "rece. de gaz bine mixat care este un rezervor de reactanţi. Zona inferioara acţionează ca un strat de frontieră laminar cu profilul vitezei având caracteristicile mediate atât ale transportului laminar cât şi ale celui turbulent, în care reactanţii sunt transportaţi prin difuzie, aşa cum se reprezintă în Fig. 8.1. Datorita consumului în procesul de creştere concentraţia reactanţilor în zona turbulentă scade de-a lungul direcţiei de transport. In acest model se obţine rata de creştere în funcţie de poziţia măsurată de la partea frontală a suportului atât pentru suport aşezat orizontal cât şi pentru suport aşezat oblic. Pentru suportul aşezat orizontal rata de crestere scade exponenţial de-a lungul suportului după legea exp(-Ax) unde $A=2D/vh^2$

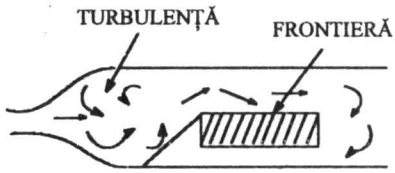


Fig. 8.1

unde v este viteza gazului, D este coeficientul de difuzie a reactantului la temperatura T si h este înălţimea iniţială a canalului deasupra suportului. Variaţia exponenţială poate fi anulată dacă se înclină suportul sub unghiul θ_c (uzual 3-5°) dat de relaţia

$$\sin\theta_c = \frac{2D_o}{bv_o}\left(\frac{T_a}{T_o}\right)^{0,88}$$

unde D_o este coeficientul de difuzie al moleculelor precursoare măsurat la T_o iar T_a este temperatura medie a gazului în partea frontala a suportului.v_o este viteza orizontală a gazului în partea frontala a suportului. Rezultă că dacă se introduc două tipuri de molecule cu coeficienti de difuzie D_o diferiţi, atunci cel puţin un tip de molecule va da naştere în crostalul crescut a unui gradient de-a lungul direcţiei de transport al gazului, indiferent de inclinarea suportului. Este de dorit sa se utilizeze precursori alkyli cu mase similare şi deci coeficienţi de difuzie similari în scopul micşorării gradientului compoziţiei aliajului crescut. Reactorul poate funcţiona la presiune atmosferică sau la presiune joasă. Mulţi autori preferă să lucreze cu reactorul la presiune joasă [5]. La presiune joasă (~0,1 atm), v_o creşte si θ_c se apropie de valoarea zero. In plus, la presiune joasă se reduce numărul reacţiilor nedorite între precursori. Desigur că se poate lucra şi în vid (10^{-4}-10^{-6}Torr). In acest caz precursorii se introduc fără un gaz purtător.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

8.2. *Instalaţia de creştere.*

Instalaţia utilizată in ÈFVOM cuprinde patru componente majore: (A) sistemul purtător de gaz, care conţine sursele de alkaly și hidraţi precum și toate valvele și instrumentele necesare pentru controlul transportului gazului purtător și mixturilor de reactanţi; (B) camera reactorului, în care are loc reacţia de piroliză și depunerea stratului; (C) sistemul de încălzire utilizat pentru obţinerea temperaturii necesară pentru piroliză; (D) sistemul de pompe pentru evacuare sau obţinerea temperaturilor joase. Vom discuta în cele ce urmează numai primele trei componente.

8.2.1. Sistemul de manevră a gazului.

Sistemul de manevră a gazului trebuie sa asigure o cantitate de reactanţi necontaminaţi măsurată cu precizie, care să nu sufere modificări nedorite. Schema sistemului de manevră este reprezentată în Fig. 8.2. Ea conţine părţile esenţiale necesare; există multe alte variante. Drept gaz purtător este în cele mai multe cazuri H_2 purificat cu Pd. Se pot utiliza și gaze inerte sau N_2. Sursele alkily sunt depuse în creuzete a căror temperatură este controlată iar fluxul de gaz purtător (H_2) este reglat cu ajutorul unui sistem electronic. Se presupune că fluxul de gaz purtător este total saturat cu vapori de alkyli și că încălzirea datorată transportului gazului prin orificiu sau răcirea datorată evaporării, au efect neglijabil asupra stabilităţii temperaturii. Hibrizii sunt introduși ca mixturi diluate în H_2 (uzual 5-10%). Fiecare din reactanţi este introdus într-o conductă obișnuită, alkylii și hibrizii în conducte separate, înainte de a se introduce în reactor. Pentru comutarea surselor de la conducta reactorului la conductele în derivaţie se utilizează valve. Acestea permit ca ţevile intermediare sa fie complet golite înainte de injecţia în reactor și, de asemenea, permit terminarea injecţiei în reactor fără să existe cantitate mare de gaz în conducte. Conductele (tuburile) și valvele se construiesc din oţel inoxidabil. Valvele principale sunt automate și conectate la un calculator;

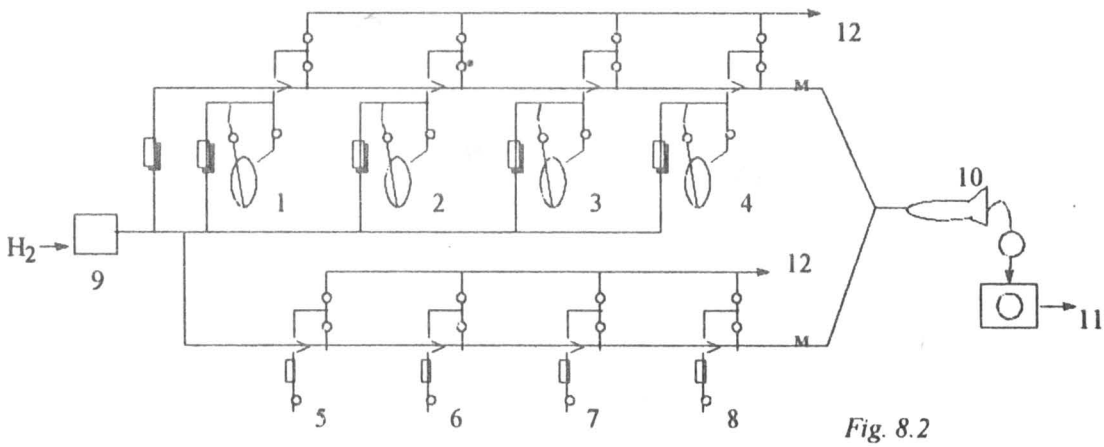


Fig. 8.2

ele se utilizează pentru controlul fluxului de substanţă. In Fig. 8.2 s-au utilizat următoarele notaţii: 1-TMGa, 2-TMAl, 3-TMIn, 4-DEZn, 5-10% PH_3 în H_2,6-10% AsH_2 în H_2,7-100 ppm SiH_4 în H_2,8-50 ppm H_2Se în H_2,9-purificator de H_2,10-reactor, 11-pompă de vid (opţional), 12-ventile. Cerculeţele indică valvele iar dreptunghiurile mici indică dispozitivele electronice de control al fluxului de masă. Proiectarea conductelor de manevră a gazului în cazul reactorului utilizat la presiune joasă este similara cu cea din cazul reactorului utilizat la

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

presiune atmosferică cu excepţia introducerii unui orificiu de control cu valvă, situat între conducte şi camera de reacţie la presiune joasă. Aceasta permite ca sistemul de manevră să functioneze la presiune fixă independent de presiunea din camera de reacţie. Sursele de alkyli trebuie menţinute la presiune constantă deoarece această presiune influenţează concentraţia de vapori din gaz.

8.2.2. **Camera de reacţie.**

Camera de reacţie poate fi verticală sau orizontală, aşa cum se reprezintă în Fig. 8.3. Ambele variante au fost utilizate iniţial în epitaxia siliciului. In configuratia verticală reactanţii se introduc în cameră prin partea de sus. Substratul se fixează plat pe un suport de grafit care se roteşte cu 2-10 rotaţii pe minut. Adeseori se utilizează la orificiu un mic deflector pentru a se dispersa fluxul. In această configuraţie este dificil să se obţină depuneri pe suprafaţă mare şi fluxul de gaz nu poate fi modelat aşa uşor ca în cazul reactorului orizontal. De asemenea, este posibil ca gazul în care s-au consumat produşii de reacţie să recircule sub formă de curenţi de convecţie, să reintre în fluxul incident şi să altereze compoziţia gazului. Reactorul orizontal conţine un suport rectangular din grafit care poate fi înclinat faţă de fluxul de gaz pentru a se îmbunătăţi uniformitatea. Uneori se fixează în faţa sa un deflector din cuarţ pentru a micşora turbulenţa determinată de geometria sistemului. Se poate obţine o depunere uniformă pe o arie cu un diametru de ~ 5 cm. Dinamica fluxului în reactorul orizontal a fost prezentată în pararaful 8.1.3. Se mai utilizează şi alte configuraţii geometrice ale reactorului.

8.2.3. Sistemul de încălzire.

Suportul se poate încălzi astfel încât sa se evite încălzirea directă a suprafeţelor învecinate, în special a fluxului de gaz de deasupra. Cea mai comodă în acest caz este încălzirea prin inducţie r.f. De asemenea, se utilizează încălzirea în infraroşu cu ajutorul unei lămpi de cuarţ cu halogen şi încălzirea cu o rezistenţă plasată sub substrat sau încastrată în suportul substratului. Incălzirea cu rezistenţă în interior nu este indicată deoarece în toţi reactorii se depune arseniu pe pereţi şi poate apare o încărcare cu sarcină de la sursa de alimentare a rezistenţei.

8.3. *Mecanisme de reacţie şi cinetica de creştere.*

Reacţiile care au loc în fază de vapori în EFVOM sunt complexe şi numai parţial studiate. Mecanismele de reacţie şi creşterea GaAs din trimetilgaliu, $Ga(CH_3)_3$, şi arsină, AsH_3, sunt prezentate în Fig. 8.4. Prima reacţie de descompunere a TMGa se presupune a fi următoarea

$$Ga(CH_3)_3+H_2 \rightarrow Ga(CH_3)+2CH_4+9 \text{ kcal/mol.}$$

Această reacţie este exotermă. H_2 este prezent din abundenţă astfel că reacţia este favorizată. Prin adsorbţia monometilgaliului pe suprafaţa cristalului se pierde şi ultimul grup metil şi rămâne Ga fixat pe suprafaţă. Descompunerea arsinei se presupune ca are loc după reacţia

$$AsH_3 \rightarrow AsH+H_2 \cdot$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

In continuare are loc reacţia

$$AsH \rightarrow As + H$$

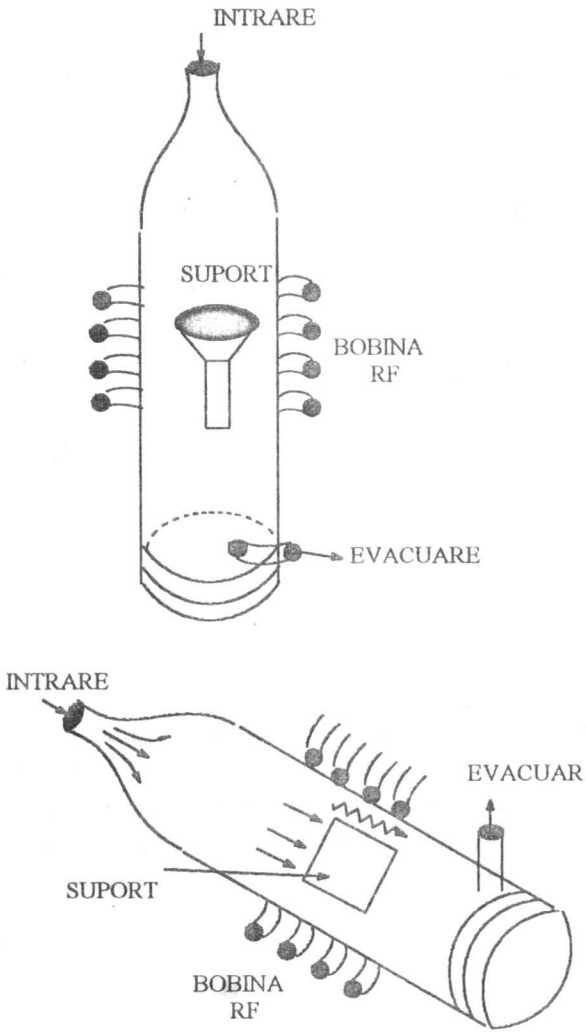


Fig. 8.3

Această reacţie este nefavorizată datorită consumului de energie necesar pentru formarea H liber şi poate avea loc numai la temperaturi înalte. Reacţia bimoleculară

$$2AsH \rightarrow As_2 + H_2$$

este mult mai favorizată dar necesită coliziunea între două molecule de AsH şi se desfăşoara cu o rata mica daca arsina este diluată. Totuşi, moleculele de AsH sunt colectate pe suprfaţa GaAs unde rata de desfăşurare a reacţiei este mult mai mare. Aceasta explică observaţia experimentală că suprafaţa GaAs acţionează ca un catalizator pentru descompunerea arsinei, (AsH_3). Având în vedere aceste consideraţii, în cazul epitaxiei GaAs pe suprafaţa cristalului au loc reacţii între moleculele adsorbite, de AsH, produsul lor de reacţie, As şi $GaCH_3$ şi produsul său de reacţie, Ga. Aceste reacţii sunt

$$2AsH \rightarrow 2As + H_2$$

$$AsH + GaCH_3 \rightarrow As + Ga + CH_4$$

$$2GaCH_3 + H_2 \rightarrow 2Ga + 2CH_4$$

$$2GaCH_3 \rightarrow 2Ga + C_2H_6$$

Prin EFVOM se obţin interfeţe atomice perfect plane. Aceasta arată că există un proces de ordonare al moleculelor adsorbite care poate fi considerat ca o creştere laterală sau o creştere treaptă şi că chiar pentru straturi puternic dezorientate (2-6° faţă de direcţia <100>) există un mecanism care menţine aproape egală distanţa dintre treptele adiacente. Acest mecanism poate apare simplu din aceea că poziţia unui atom de galiu în interiorul treptei este favorizată energetic faţă de poziţia pe restul suprafeţei, iar poziţia sa deasupra treptei este mai puţin favorizată energetic, decât orice altă poziţie pe suprafaţă. Poziţia de deasupra barierei va acţiona ca o barieră de potenţial pentru moleculele adsorbite care difuzează pe suprafaţă. Aceasta înseamnează că treptele sunt alimentate numai dintr-o parte şi dacă în timpul creşterii se apropie două trepte una de alta, adică o treaptă începe să "o prindă. Din urmă pe cealaltă, din punct de vedere statistic ea este alimentata mai putin cu atomi deoarece aria suprafeţei

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

dintre aceasta şi treapta de care s-a apropiat, de unde ea îşi colectează atomii, se micşorează. In Fig. 8.5 se repre-zintă cele expuse mai sus, cum o suprafaţă rezorien-tată rămâne plană şi ordonată iar distan-ţele dintre trepte, pe cât posibil stabile. Prin urmare, atomii adsorbiţi pe supra-faţă difuzează până când îşi găsesc poziţiile de echilibru termodinamic (energie minimă) în interiorul unei trepte (într-un colţ). Mecanismele de reacţie în cazul AlGaAs

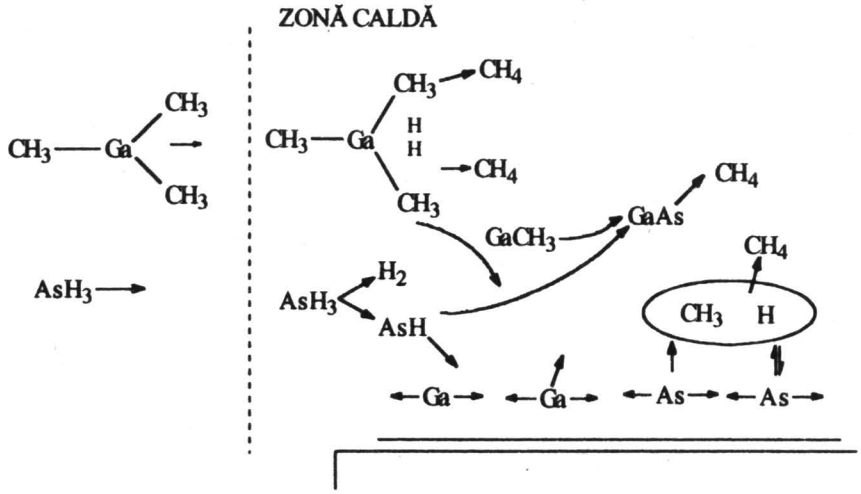


Fig.. 8.4

obţinut prin EFVOM sunt similare cu cele ale GaAs. In acest scop se utuizează pe lânga TMGa şi TMAl. In cazul creşterii GaAs s-a observat că rata de creştere depinde de presiunea parţială a alkylului din grupa a III-a în reactor şi este slab dependentă de orientarea substratului, temperatura de creştere (400-850°C) şi presiunea parţială a AsH_3 (cu condiţia ca AsH_3 sa fie în exces). Ca dopanţi pentru obţinerea conducţiei de tip p se utilizează Zn şi Mg şi mai puţin Cd şi Be. Aceştia se obţin din alkyli: de exmplu Zn din DMZn şi DEZn iar Mg din Cp_2Mg. Ca materiale donoare se utilizează dopanţi din grupa a IV-a Si, Ge sau Sn, din materialele SiH_4, GeH_4 şI, respectiv, TMSn sau TESn, sau din grupa a VI-a ca S, Se şi Te din materialele H_2S, H_2Se şi DETe. Detalii asupra crşterii prin EFVOM a semiconductorilor III-V, cititorul găseşte în [1]. Pentru ca EFVOM să devină o tehnologie de producţie a materialelor si dispozitivelor semicon-ductoare, capabilă să producă straturi uniforme pe suprafaţă mare şi cu interfeţe abrupte precum şi nivele de dopare dorite trebuie rezolvate următoarele probleme: (1) identificarea compuşilor chimici din gaz şi pe suprafaţă în timpul creşterii (in situ), (2) caracterizarea traiectoriei reacţiei, (3) studiul cineticii chimice a reacţiilor din faza gazoasă şi de pe suprafaţă, (4) realizarea unor modele detaliate de transport şi reacţii care să coreleze performanţele de creştere cu condiţiile de funcţionare a reactorului, (5) proiectarea şi evaluarea unor noi configuraţii de reactori. In ţara noastra exista o instalaţie EFVOM la Institutul de Microtehnologii din Bucureşti.

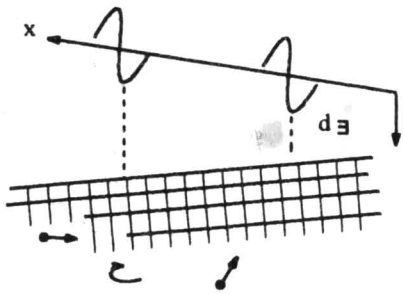


Fig. 8.5

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Bibliografie.

1. M. J. Ludowise, J. Appl.Phys.54, R31 (1981).
2. K. Jensen, J. Crystal Growth, 98, 148 (1989).
3. V. S. Ban, J. electrochem. Soc. 125, 317 (1978).
4. S. Berkman, V. Ban, N. Goldsmith, în Heterojunction semiconductors for electronic devices, ed. G. Culden, C. Wang, Springer, 1977.
5. J. E. Venhoff, W. Pletschen, P. Balk, H. Luth, J. Crystal Growth, 55, 30 (1981).

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Anexa

Constanta dielectrică.

1. Teoria elementară a constantei dielectrice.

Considerăm un electron de sarcină -q situat într-o moleculă. O undă electromagnetică incidentă, monocromatică, liniar polarizată, care are frecvenţa ω diferită de toate frecvenţele de absorbţie ale moleculei nu este influenţată de polarizaţia moleculei. In aceste condiţii unda electromagnetică poate fi descrisă cu ajutorul unui câmp electric extern, omogen, de amplitudine F_o şi frecvenţă ω. Neglijăm influenţa câmpului magnetic al undei asupra sistemului. Presupunem că unda oscilează în direcţia axei x şi deci câmpul electric $\mathbf{F}=F_o\mathbf{e}_x\sin\omega t$ unde $\mathbf{e}_x$ este vectorul de polarizare în direcţia x. Potenţialul electric V este corelat cu câmpul **F** prin relaţia $\mathbf{F}=-\nabla V$ astfel că $V(\mathbf{r},t)=V(x,t)=-qxF_o\sin\omega t$. Energia potenţială pe care o simte electronul este $U(\mathbf{r},t)=-qV(\mathbf{r},t)=qxF_o\sin\omega t$ iar ecuaţia Schrodinger care descrie mişcarea electronului în moleculă se scrie

$$(H_o+qxF_o\sin\omega t)\Psi(\mathbf{r},t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) \qquad (1.1)$$

Considerăm funcţia de undă de forma

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\Psi_o(R)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_o t)+F_o\Psi_1(\mathbf{r},t)$$

unde Ψ_o este funcţia de undă care descrie starea fundamentală E_o a electronului în moleculă, asociată Hamiltonianului H_o. Ψ_1 este corecţia de ordinul întâi la starea fundamentală stationară într-un potenţial periodic în timp. Considerăm

$$\Psi_1(\mathbf{r},t)=C_1(\mathbf{r})\exp[-\frac{i}{\hbar}(E_o+\hbar\omega)t]+C_2(\mathbf{r})\exp[-\frac{i}{\hbar}(E_o-\hbar\omega)t] \qquad (1.3)$$

Substituind (1.2) în (1.1) ecuaţia Schrodinger devine

$$(H_o+qxF_o\sin\omega t)[\Psi_o(\mathbf{r})\exp(-\frac{i}{\hbar}E_o t)+F_o\Psi_1(\mathbf{r},t)]=E_o\Psi_o(\mathbf{r})\exp(-\frac{i}{\hbar}E_o t)+$$
$$i\hbar F_o\frac{\partial}{\partial t}\Psi_1(\mathbf{r},t)$$

Comparând termenii liniari în F_o in ambii membri ai acestei ecuaţii se obţine

$$qxF_o\sin\omega t\Psi_o\exp[-\frac{i}{\hbar}E_o t]+F_oH_o\Psi_1(\mathbf{r},t)=i\hbar F_o\frac{\partial}{\partial t}\Psi_1(\mathbf{r},t)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

sau

$$[H_o - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}]\Psi_1(\mathbf{r},t) = -qx\sin\omega t\Psi_o(\mathbf{r})\exp(-\frac{i}{\hbar}E_o t)$$

Scriem $\sin\omega t = \frac{1}{2i}[e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$ și având în vedere (1.3) rezultă

$$H_oC_1\exp[-\frac{i}{\hbar}(E_o+\hbar\omega)t] + H_oC_2\exp[-\frac{i}{\hbar}(E_o-\hbar\omega)t] - (E_o+\hbar\omega)C_1\exp[-\frac{i}{\hbar}(E_o+\hbar\omega)t] -$$

$$(E_o-\hbar\omega)C_2\exp[-\frac{i}{\hbar}(E_o-\hbar\omega)t] = -\frac{qx}{2i}\Psi_o\exp(-\frac{i}{\hbar}E_o t)(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

In această ecuaţie se poate simplifica factorul comun $\exp[-(i/\hbar)E_o t]$. Funcţiile e^{iwt} si e^{-iwt} sunt liniar independente astfel că coeficienţii lor se anulează si rezultă

$$\begin{aligned} H_oC_1 - (E_o+\hbar\omega)C_1 &= \frac{qx}{2i}\Psi_o \\ H_oC_2 - (E_o-\hbar\omega)C_2 &= -\frac{qx}{2i}\Psi_o \end{aligned} \qquad (1.4)$$

$E_o+\hbar\omega$ nu este o valoare proprie a lui H_o ceea ce însemnează că ω poate fi o frecvenţă de absorbţie. De asemenea, $E_o-\hbar\omega$ nu este o valoare proprie a lui H_o deoarece E_o este cea mai mică valoare proprie a lui H_o, care reprezinta starea fundamentală. Prin urmare, aceste două ecuaţii nu au solutie omogenă şi pot fi rezolvate fără dificultăţi. Notăm cu E_j (j=0,1,2,..) valorile proprii ale lui H_o,pe care le presupunem discrete, si cu ϕ_j funcţiile proprii corespunzătoare,

$$H_o\phi_j = E_j\phi_j$$

Atunci C_1 se poate dezvolta în serie după ϕ_j

$$C_1 = \sum_{j=0}^{\infty} b_j\phi_j$$

Substiruind în prima ecuaţie (1.4) rezultă

$$\sum_{j=0}^{\infty} b_jE_j\phi_j - (E_o+\hbar\omega)\sum_{j=o}^{\infty} b_j\phi_j = \frac{qx}{2i}\Psi_o$$

Inmulţim la stânga cu ϕ_l^* şi integrăm. Se obţine

$$b_l(E_l - E_o - \hbar\omega) = \frac{1}{2i} < \phi_l|qx|\Psi_o >$$

şi

$$C_1(\mathbf{r}) = \frac{q}{2i}\sum_{j=1}^{\infty}\frac{<\phi_j|x|\Psi_o>}{E_j - E_o - \hbar\omega}\phi_j(\mathbf{r})$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

In mod analog se obtine

$$C_2(\mathbf{r}) = -\frac{q}{2i}\sum_{j=1}^{\infty}\frac{<\phi_j|x|\Psi_o>}{E_j - E_o + \hbar\omega}\phi_j(\mathbf{r})$$

Prin urmare, funcţia de undă poate fi scrisă astfel

$$\Psi(\mathbf{r},t) = [\Psi_o(\mathbf{r}) + \frac{qF_o}{2i}\sum_{j=1}^{\infty}\phi_j(\mathbf{r}) <\phi_j|x|\Psi_o> (\frac{e^{-i\omega t}}{E_j - E_o - \hbar\omega} - \frac{e^{i\omega t}}{E_j - E_o + \hbar\omega})]\exp[-\frac{i}{\hbar}E_o t]$$

In absenţa unui câmp electric extern molecula se găseşte în starea fundamentală Ψ_o, fără moment de dipol, adică

$$<\mathbf{p}>_o = -q\int \Psi_o^* \mathbf{r} \Psi_o dV = 0$$

Pentru a calcula constanta dielectrică utilizăm definiţia acestei mărimi cu ajutorul relaţiei

$$\varepsilon\mathbf{F} = \varepsilon_o\mathbf{F} + \mathbf{P} = \mathbf{D} \qquad (1.5)$$

şi introducem polarizarea **P** într-un solid neconductor prin intermediul relaţiei

$$\mathbf{P} = P\mathbf{e}_x = N\,\overline{p}\mathbf{e}_x$$

unde N este numărul de molecule pe unitatea de volum şi $\overline{p}$ este media momentului de dipol, $-q\int \Psi^* x \Psi dV$, liniar în F_o, al unei singure molecule, orientat în direcţia x. Pentru a calcula constanta dielectrică a solidului, calculăm întâi momentul de dipol mediu în direcţia câmpului electric al undei

$$-q <\Psi|x|\Psi> = \frac{-q^2F_o}{2i}\sum_{j=1}^{\infty}|<\phi_j|x|\Psi_o>|^2 (\frac{e^{-i\omega t}}{E_j - E_o - \hbar\omega} - \frac{e^{i\omega t}}{E_j - E_o + \hbar\omega}) + \frac{q^2F_o}{2i}\sum_{j=1}^{\infty}|<\phi_j|x|\Psi_o>|^2 (\frac{e^{i\omega t}}{E_j - E_o - \hbar\omega} - \frac{e^{-i\omega t}}{E_j - E_o + \hbar\omega}) \qquad (1.6)$$

Prin urmare,

$$\overline{p} = \frac{q^2F_o}{2i}\sum_{j=1}^{\infty}|<\phi_j|x|\Psi_o>|^2 2i\sin\omega t\frac{2(E_j - E_o)}{(E_j - E_o)^2 - (\hbar\omega)^2}$$

In absenţa câmpului electric, $F_o=0$, este populată numai starea fundamentală $\Psi_o=\phi_{j=0}$, al cărei moment de dipol se anulează $<\Psi_o|x|\Psi_o>=0$. Prin urmare câmpul electric al undei electromagnetice polarizează parţial atomul sau molecula.

Dacă notăm $\hbar\omega_j = E_j - E_o$ şi definim forţa oscilatorului

$$f_j = \frac{2m}{\hbar}|<\phi_j|x|\Psi_o>|^2\omega_j \qquad (1.7)$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde m este masa oscilatorului, ecuaţia (1.5) devine

$$\varepsilon F_o \mathbf{e}_x \sin\omega t = \varepsilon_o F_o \mathbf{e}_x \sin\omega t + \mathbf{e}_x \frac{2Nq^2}{\hbar}\sum_{j=1}^{\infty}\left|<\phi_j|x|\Psi_o>\right|^2 \frac{\omega_j}{\omega_j^2-\omega^2} F_o \sin\omega t =$$

$$(\varepsilon_o + \frac{Nq^2}{m}\sum_{j=1}^{\infty}\frac{f_j}{\omega_j^2-\omega^2})\varepsilon_o \mathbf{e}_x \sin\omega t$$

Se obţine pentru constanta dielectrică expresia

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_o + \frac{Nq^2}{m}\sum_{j=1}^{\infty}\frac{f_j}{\omega_j^2-\omega^2} \tag{1.8}$$

Aceasta coincide cu expresia clasică a constantei dielectrice. Am arătat în capitolul III că

$$f_j = \frac{2m}{\hbar}\left|<\phi_j|x|\Psi_o>\right|^2\omega_j = \frac{2}{m\hbar\omega_j}\left|<\phi_j|\hat{p}_x|\Psi_o>\right|^2 \tag{1.9}$$

unde $\hat{p}_x$ este componenta operatorului impuls în direcţia x.

$$\hat{p}_{jo} =<\phi_j|\hat{p}_x|\Psi_o>$$

se numeşte operatorul de tranziţie al impulsului. In cazul cuantic nu apare direct amortizarea ca în cazul clasic. Ea poate fi pusă în evidenţă dacă ţinem seama că în realitate în expresia (1.3) trebuie să introducem un factor ~ exp(-Γt), care să exprime scăderea în timp a lui C_1 şi C_2 după aplicarea perturbaţiei. In acest caz relaţia (1.6) devine

$$-q<\Psi|x|\Psi>= -\frac{q^2F_o}{2i}\sum_{j=1}^{\infty}\left|<\phi_j|x|\Psi_o>\right|^2\left(\frac{e^{-i\omega t-\Gamma t}}{E_j-E_o-\hbar\omega-i\hbar\Gamma}-\frac{e^{i\omega t-\Gamma t}}{E_j-E_o+\hbar\omega-i\hbar\Gamma}\right)+$$

$$\frac{q^2F_o}{2i}\sum_{j=1}^{\infty}\left|<\phi_j|x|\Psi_o>\right|^2\left(\frac{e^{i\omega t-\Gamma t}}{E_j-E_o-\hbar\omega-i\hbar\Gamma}-\frac{e^{-i\omega t-\Gamma t}}{E_j-E_o+\hbar\omega-i\hbar\Gamma}\right) \tag{1.11}$$

Tensorul constantei dielectrice $\varepsilon_{\alpha\beta}$ definit prin relaţia

$$D_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta}F_\beta$$

unde α, β = x, y, z într-un semiconductor omogen, se poate scrie

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \bar{\varepsilon}_{\alpha\beta} + \frac{q^2}{m^2\omega^2 V}\sum_{sjk}\frac{p^{\alpha}_{vs,cj}(\mathbf{k})p^{\beta}_{cj,vs}(\mathbf{k})}{E_{ck}-E_{vsk}-i\hbar\Gamma_{cv}} \tag{1.11}$$

unde $\bar{\varepsilon}_{\alpha\beta}$ este contribuţia nerezonantă la constanta dielectrică, V este volumul cristalului, E_{ck} şi E_{vsk} sunt energiile electronului în banda deconducţie (c) şi, respectiv, de valenţă (v s), **k** este vectorul de undă, $p^{\alpha}_{cj,vs}(\mathbf{k})$ este elementul de matrice al impulsului calculat între stările Bloch | cj**k**> şi | vs**k**>, Γ_{cv} este factorul de amortizare. Atunci când materialul semiconductor are simetrie cubică, extremurile benzilor sunt în punctul Γ şi tranziţiile optice în punctul de

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

extrem sunt permise. In semiconductorii din clasa de simetrie T_d ,banda de conducţie are extrem în Γ_6 iar banda de valenţă are extrem în Γ_7. Pentru un cristal cu simetrie cubică cu benzi nedegenerate, din (1.11) se obţine următoarea expresie a componentei rezonante a constantei dielectrice pentru $\Gamma_{cv}=0$

$$\varepsilon^{rez}(\omega)=\left(\frac{qP_{cv}}{m\omega}\right)^2\left(\frac{2\mu_{cv}}{\hbar^2}\right)^2\begin{cases}(E_o-\hbar\omega)^{1/2},\hbar\omega<E_o\\ i(\hbar\omega-E_o)^{1/2},\hbar\omega>E_o\end{cases} \tag{1.12}$$

E_o este banda interzisă în punctul de extrem $\mathbf{k}=0,\mu_{cv}=m_cm_v/(m_c+m_v)$ este masa efectivă redusă şi

$$P_{cv}^2=\sum_{js}\left|p_{cj,vs}^{\alpha}(0)\right|^2 \tag{1.13}$$

unde α este una din coordonatele x, y, z. Pentru tranziţia interbenzi din banda de valenţă Γ_7 despicată datorită interacţiei spin-orbită din banda Γ_8 avem

$$E_o=E_g+\Delta;\quad P_{cv}^2=\frac{2}{3}\left|<S|P_z|X>\right|^2 \tag{1.14}$$

unde Δ este intervalul energetic dintre cele doua subbenzi. Expresia (1.12) este valabilă, de asemenea, pentru tranziţiile din subbanda golurilor grele sau uşoare dacă m_v se înlocuieşte cu masa efectivă corespunzătoare (m_{hh} sau m_{lh}).

2. Constanta dielectrică într-o structură periodică.

Intr-o structură periodică de văi cuantice şi bariere tensorul constantei dielectrice este dat de expresia

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega)=\bar{\varepsilon}_{\alpha\beta}+\frac{q^2}{m^2\omega^2(a+b)S}\sum_{jsk_tnn'}\frac{p_{vn's,cnj}^{\alpha}(\mathbf{k}_t)p_{cnj,vn's}^{\beta}(\mathbf{k}_t)}{E_{cnk_t}-E_{vn'sk_t}-\hbar\omega-i\hbar\Gamma_{cv}} \tag{2. 1}$$

unde $p_{cnj,vn's}^{\alpha}(\mathbf{k}_t)$ este elementul de matrice calculat între stările Bloch $|cnj\mathbf{k}_t>$ şi $|vn's\mathbf{k}_t>$ din spaţiul 2D din valea cuantică de potenţial, n şi n′ sunt indicii subbenzilor din banda de conducţie şi de valenţă apărute datorită efectelor de cuantificare. $\mathbf{k}_t$ este vectorul de undă din spaţiul 2D. In relaţia (2.1) a+b=d este perioada iar S este aria structurii cuantice. Presupunând că cristalul are simetrie cubică şi benzi nedegenerate se obţine din (2.1) pentru contribuţia rezonantă la constanta dielectrică, în cazul $\Gamma_{cv}=0$, expresia

$$\varepsilon^{rez}(\omega)=\left(\frac{qP_{cv}}{\hbar m\omega}\right)^2\frac{2\mu_{cv}}{a+b}\sum_n[\ln\frac{E}{\left|E_o^{nn'}-\hbar\omega\right|}+i\pi\Theta(\hbar\omega-E_o^{nn'})] \tag{2.2}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$E_o^{nn'}$ este banda interzisă în punctul k_t=0 dintre subbanda n din banda de conducţie şi subbanda n′ din banda de valenţă. Pentru bariera de înălţime infinită

$$p_{cjn,vsn'} = p_{cj,vs}\int \chi^*_{en}(x)\chi_{hn'}(x)dx = p_{cj,vs}\delta_{nn'} \qquad (2.3)$$

Pentru calculul elementului de matrice al impulsului s-au utilizat funcţiile de undă ale electronului şi golului din valea cuantică de potenţial din subbenzile n si n′ (capitolul II)

$$\begin{aligned}\Psi_{njk_t}(\mathbf{r}) &= e^{ik_t r_t}\chi_{enk_t}(x)u_{cj}(\mathbf{r})\\ \Psi_{n'sk_t}(\mathbf{r}) &= e^{ik_t r_t}\sum_l \chi_{hn'sk_t,l}(x)u_{vl}(\mathbf{r})\end{aligned} \qquad (2.4)$$

unde $u_{cj}(\mathbf{r})$, $u_{vl}(\mathbf{r})$ sunt funcţiile Bloch în punctul Γ în spaţiul cu trei dimensiuni. Relaţia (2.3) defineşte o regulă de selecţie care admite numai tranziţiile n=n′, pentru aceleaşi umere cuantice ale subbenzilor între care au loc tranziţiile. Relaţia (2.2) este valabilă şi în semiconductorii cu benzi nedegenerate şi văi cuantice simetrice. P_{cv}^2 definit de relaţia (1.13) pentru tranziţiile între stările cuantice din subbenzile de valenţă Γ_8 în banda de conducţie, au valorile

$$P_{cv}^2(\mathbf{e}\perp x) = |< S|p_z|X >|^2, \qquad P_{cv}^2(\mathbf{e}\| x) = 0$$

în cazul tranziţiilor din subbanda golurilor grele din starea n în subbanda de conducţie din starea n şi

$$P_{cv}^2(\mathbf{e}\perp x) = \frac{1}{3}|< S|p_z|X >|^2, \qquad P_{cv}^2(\mathbf{e}\| x) = \frac{4}{3}|< S|p_z|X >|^2$$

în cazul tranziţiilor din subbanda golurilor uşoare, starea n, în subbanda n din banda de conducţie. Cu **e** s-a notat vectorul de polarizare a radiaţiei. Intr=o superreţea cu perioada mică (subţire) electronii si golurile din subbenzi pot fi considerate în spaţiul tridimensional şi pentru constanta dielectrică se utilizează relaţia (1.11), în care indicii c şi v includ si numărul minibenzii. Să considerăm cazul în care $m_c << m_v$. In acest caz numai mişcarea electronilor din banda de conducţie poate fi considerată în spaţiul tridimensional deoarece tunelarea golurilor între văile adiacente se poate neglija. Componenta de rezonanţă a constantei dielectrice în cazul tranziţiei din subbanda golurilor uşoare hl în subbanda 1 a electronilor din banda de conducţie se obţine expresia

$$\varepsilon^{rez}(\omega) = \left(\frac{qP_{cv}}{m\omega}\right)^2 \frac{2\mu_t}{\hbar^2}\left(\frac{2M_l^e}{\hbar^2}\right)^{1/2} I^2(E_o - \hbar\omega)^{1/2} \qquad (2.5)$$

unde $E_o=E_g+E_{e1}+E_{hl}$, $\mu_t=M_t^e m_v/(M_t^e+m_v)$; M_l^e, M_t^e sunt masele, longitudinală şi, respectiv, transversală, ale electronului la marginea inferioara a subbenzii celei mai de jos din banda de conducţie. Factorul I este dat de expresia

$$I = \int \chi_{en}(x)\chi_{hl}(x)dx$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Funcţia $\chi_{hl}(x)$ este o funcţie din valea cuantică de potenţial cu pereţi infiniţi. Funcţia $\chi_{en}(x)$ poate fi dezvoltată în funcţii super-Bloch

$$\chi_{en}(x) = e^{ik.r} u_{nk}(x), \quad u_{nk}(x+d) = u_{nk}(x)$$

La marginea inferioară a celei mai de jos minibenzi, funcţia super-Bloch se poate scrie

$$u_o(x) = \begin{cases} C_a \cos k(x - \bar{x}_a), \\ C_b \cos k_1(x - \bar{x}_b) \end{cases}$$

în valea cuantică şi respectiv în barieră unde C_a este dat de expresia (paragraful 2.11)

$$C_a^2 = 2(a+b)[a(1+\frac{\sin ka}{ka}) + b(1+\frac{\sinh k_1 b}{k_1 b})\frac{1+\cos ka}{1+\cosh k_1 b}]^{-1}$$

Se obţine

$$I^2 = [\int \frac{u_o(x)}{\sqrt{a+b}} \chi_{hl}(x) dx]^2 = \frac{4a}{a+b} C_a^2 \frac{\pi^2(1+\cos ka)}{[\pi^2 - (ka)^2]} \tag{2.6}$$

Dacă notăm cu ε' partea reală si cu ε'' partea imaginară a constantei dielectrice, coeficientul de absorbţie poate fi definit prin expresia

$$\alpha = \frac{\omega}{c} \frac{\varepsilon''}{\sqrt{\varepsilon'}}$$

Pentru cristalul masiv se obţine din (1.13) expresia

$$\alpha^{(3D)}(\omega) = 2 \frac{q^2}{\hbar c n(\omega)} \frac{\mu_{cv}}{m} \frac{P_{cv}^2}{m\hbar\omega} [2\mu_{cv}(\hbar\omega - E_o)/\hbar^2]^{1/2} \tag{2.7}$$

iar pentru o structura periodică se obţine din (2.2)

$$\alpha^{SR}(\omega) = 2 \frac{q^2}{\hbar c n(\omega)} \frac{\mu_{cv}}{m} \frac{P_{cv}^2}{m\hbar\omega} \frac{\pi}{a+b} \sum_n \Theta(\hbar\omega - E_o^{nn}) \tag{2.8}$$

unde $n(\omega) = \sqrt{\varepsilon'}$. Pentru o singură vale cuantică

$$\alpha_{sv} = \frac{a+b}{a} \alpha_{SR} \tag{2.9}$$

Diferenţa dintre coeficientul de absorbtie din cazul tridimensional (2.7) şi cel din cazul bidimensional (2.9) se datorează dependenţei de energie a densităţii de stări în cele doua cazuri.

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

3. Constanta dielectrică în cazul tranzițiilor excitonice.

Într-o formă mai generală se poate scrie înt-un semiconductor intrinsec expresia (1.12) sub forma

$$\varepsilon_{\alpha\beta}^{rez}(\omega,\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar\omega^2 V}\sum_{f\neq 0}\frac{j_{o,f}^{\alpha}(-\mathbf{k})j_{f,0}^{\beta}(\mathbf{k})}{\omega_f - \omega - i\Gamma_f} \tag{3.1}$$

unde $\hbar\omega_f$ este energia stării excitate atât în cazul excitonilor din spectrul discret ($\hbar\omega_f < E_g$) cât și în cazul $\hbar\omega_f > E_g$ și miș carea relativă a perechii electron-gol este influențată de interacția Coulomb. $j_{f,o}(\mathbf{k})$ este elementul de matrice al operatorului densitate de curent multiparticulă

$$\hat{j}(\mathbf{k}) = -\frac{q}{2m}\sum_{v}(\hat{p}_v e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}_v} + e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}_v}\hat{p}_v) \tag{3.2}$$

sumarea v este după numărul de electroni. In general, expresia (3.1) include dispersia spațială, pe care o neglijăm în continuare. Dacă nu se ia în considerare interacția Coulomb, în cazul tranziției unui electron din starea v$\bar{s}$,**k**=0 în starea cj,**k**=0 (starea $\bar{s}$ este legată de starea s printr-o operație de inversie), se obține

$$j_{f,o}^{\alpha} = -\frac{q}{m}p_{cj,vs}^{\alpha} \tag{3.3}$$

Atunci când tranziția cj→vs,μ, este o tranziție care implică excitarea unui exciton μ (în spectrul discret sau continuu) avem

$$j_{f,o}^{\alpha}(0) = -\frac{q}{m}p_{cj,vs}^{\alpha}\sqrt{V}\varphi_{\mu}^{*}(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h = 0) \tag{3.4}$$

unde $\varphi_\mu(\mathbf{r})$ este funcția anvelopă, care descrie mișcarea relativă a electronului și golului, din funcția de undă a excitonului

$$\Psi_{j\bar{s}\mu} = \frac{e^{i\mathbf{k}.\mathbf{R}}}{\sqrt{V}}\varphi_\mu(\mathbf{r})u_{cj}^{(0)}(\mathbf{r}_e)u_{vs}^{(0)}(\mathbf{r}_h) \tag{3.5}$$

$u^{(0)}(\mathbf{r})$ este amplitudinea funcției Bloch tridimensionale în punctul Γ. Având în vedere (3.5) expresia (3.1) devine

$$\varepsilon(\omega) = \bar{\varepsilon} - \sum_{n=1}^{\infty}\frac{f_n^{(3D)}}{\omega_g - (E_i/\hbar n^2) - \omega - i\Gamma_n} + \frac{q^2}{2m^2\omega^2}P_{cv}^2\int_0^{\bar{E}}\frac{g_{cv}^{(3D)}S^{(3D)}(E)}{E_g - \hbar\omega + E - i\hbar\Gamma}dE \tag{3.6}$$

$\bar{\varepsilon}$ este contribuția nerezonantă, $\hbar\omega_g = E_g$ și forța oscilatorului pentru excitonul n este dată de expresia

$$f_n^{(3D)} = \frac{1}{n^3}\frac{4q^2}{a_B^2 m\omega}\frac{P_{cv}^2}{m\hbar\omega} \tag{3.7}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

g_{cv}^{3D} este dată de expresia

$$g^{(3D)}(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2\mu_{cv}}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$$

și

$$S^{(3D)}(E) = \frac{Z}{1-\exp(-Z)}. \qquad Z = 2\pi\left(\frac{E_i}{E}\right)^{1/2} \tag{3.8}$$

Așa cum rezultă din (3.6), pentru $\hbar\omega > E_g$ coeficientul de absorbție care include interacția Coulomb se obține din (2.7) prin multiplicarea acesteia cu factorul lui Sommerfeld (3.8)

$$\alpha^{(3D)}(\omega) = \frac{q^2}{\hbar c n(\omega)} \frac{\mu_{cv}}{m} \frac{p_{cv}^2}{m\hbar\omega} \frac{1}{a_B} \frac{1}{1-e^{-Z}} \tag{3.9}$$

Intr-o structură periodică constanta dielectrică, luând în considerare interacția Coulomb, este dată de expresia

$$\varepsilon(\omega) = \bar{\varepsilon} + \sum_{\beta} \frac{f_\beta^{SR}}{\omega_\beta - \omega - \Gamma}, \quad f_\beta^{SR} = f_l^{(3D)} \frac{\pi a_B^3}{a+b} \left| \int \varphi_\beta(0,x,x)dx \right|^2 \tag{3.10}$$

f_l^{3D} este dat de expresia (3.7) pentru n=1. $\varphi_\beta(\rho,x_e,x_h)$ este anvelopa funcției de undă a excitonului într-o structură cu o singură vale de potențial

$$\Psi_j = \frac{e^{iK_t R_t}}{\sqrt{S}} \varphi_\beta(\rho, x_e, x_h) u_{cj}^o(\mathbf{r}_e) u_{vs}^o(\mathbf{r}_h)$$

și satisface condiția de normare

$$\int \left|\varphi_\beta(\rho, x_e, x_h)\right|^2 d\rho dx_e dx_h = 1$$

Alegând

$$\varphi(\rho,x_e,x_h) = \chi_e(x_e)\chi_h(x_h)G(\rho,x)$$

unde $x=x_e-x_h$, se obține

$$\int \varphi_l(0,x,x)dx = G(0,0)\int \chi_{el}(x)\chi_{hl}(x)dx$$

indicele 1 se refera la excitonul în starea fundamentală, n=1. Dacă în expresia (2.8) a coeficientului de absorbție într-o structură multiplă de văi cuantice (SMV) pentru $\hbar\omega > E_o^{nn}$ se ia în considerare interacția Coulomb, atunci funcția $\Theta(\hbar\omega - E_o^{nn})$ trebuie înmulțită cu factorul Sommerfeld $S_n(\hbar\omega - E_o^{nn})$. In cazul bidimensional ideal factorul Sommerfeld este de forma

$$S^{(2D)} = \frac{2}{1+e^{-Z}} \tag{3.11}$$

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

unde Z este dat de expresia (3.8). Se observa ca $S^{(2D)}$ variaza de la valoarea 1 (pentru $E\to 0$) la valoarea 2 (pentru $E\to\infty$) în timp ce $S^{(3D)}\to\infty$ pentru $E\to 0$. Prin urmare, confinarea în valea cuantică reduce efectul interacţiei Coulomb asupra spectrului de absorbţie a luminii în continuu ($\hbar\omega > E_o^{nn}$). Pe de altă parte, confinarea cuantică determină creșterea forţei oscilatorului pentru excitarea excitonului în spectrul discret. Pentru a calcula această creștere considerăm interacţia Coulomb dintre electron si gol în cazul bidimensional. Starea fundamentală a excitonului este descrisă în acest caz de funcţia

$$\varphi(\rho,x_e,x_h)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{\pi}}\dfrac{4}{aa_B}\cos\dfrac{\pi x_e}{a}\cos\dfrac{\pi x_h}{a}e^{-2\rho/a_B}, & |x_{e,h}|<\dfrac{a}{2}\\ 0, \quad |x_{e,h}|>\dfrac{a}{2}\end{cases}$$

şi prin urmare,

$$\left[\int\varphi_{n=1}(0,x,x)dx\right]^2=\frac{8}{\pi a_B^2}$$

Introducând această valoare în (3.10) se obţine contribuţia acestui exciton la constanta dielectrică

$$\varepsilon_{n=1}(\omega)=\frac{f_1^{(2D)}}{\omega_1-\omega-i\Gamma_1},\qquad f_1^{(2D)}=\frac{8a_B}{a+b}f_1^{(3D)} \tag{3.12}$$

Această expresie este obţinută în aproximaţia $a<a_B$ astfel că pentru a comparabil cu b rezultă $f_1^{(2D)}>f_1^{(3D)}$. Semnificaţia fizică a acestui rezultat este următoarea. Barierele presează electronul şi golul în excitonul din valea cuantică determinând o creştere a probabilităţii ca acestea să se găsească în acelaşi punct şi să crească constanta de cuplaj exciton-foton. Expresia generală a componentei rezonante a lui ε în cazul bidimensional se scrie

$$\varepsilon_{rez}^{(2D)}(\omega)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{f_n^{(2D)}}{\omega_n-\omega-i\Gamma_n}+\frac{2\pi}{a+b}\left(\frac{qP_{cv}}{m\omega}\right)^2\int_0^{\bar{E}}\frac{g^{(2D)}(E)S^{(2D)}(E)}{E_o^{nn}-\hbar\omega+E-i\hbar\Gamma}dE=$$

$$f_1^{(2D)}\left(\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(2n-1)^3}{\omega_n-\omega-i\Gamma_n}+\frac{\hbar}{32E_i}\int_0^{\bar{E}}\frac{dE}{E_o^{nn}-\hbar\omega+E-i\hbar\Gamma}\frac{1}{1+e^{-Z}}\right); \tag{3.13}$$

$$\hbar\omega_n=E_o^{nn}-\frac{4E_i}{(2n-1)^2};\qquad f_n^{(2D)}=\frac{f_1^{(2D)}}{(2n-1)^3}$$

Această expresie s-a obtinut prin adăugarea la (3.12) a celorlalte contribuţii rezonante. Cu scăderea grosimii barierei devine tridimensională mai întâi mişcarea electronilor (deoarece au masa efectivă mai mică decât golurile) şi apoi şi a golurilor. Deoarece $f^{(2D)}>f^{(3D)}$ rezultă că într-o structură periodica cu $a\approx b$, cu scăderea perioadei forţa oscilatorului creşte, atinge un maxim şi apoi scade. Intr-o superreţea în care mişcarea electronilor este tridimensională iar a golurilor este bidimensională se obţine

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

$$f_l^{SR} = f_l^{(3D)} \frac{a_B^2}{a_l a_t^2} I^2 \tag{3.14}$$

unde I^2 este definit de expresia (2.6) iar a_l și a_t sunt parametri variaţionali ai funcţiei de probă

$$G(\rho, x) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_l a_t^2}} \exp[-(\frac{\rho^2}{a_t^2} + \frac{x^2}{a_l^2})^{1/2}]$$

definiţi în paragraful 2.11. Să considerăm acum funcţia de undă a excitonului ca o combinaţie de funcţii de undă ale electronului si golului când acestea nu interacţionează între ele

$$\Psi_{exc} = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{n'jk_t} G_{nn'j}(\mathbf{k}_t) \Psi_{nsk_t}(\mathbf{r}_e) \Psi^h_{n'j,-\mathbf{k}_t+\mathbf{K}_t}(\mathbf{r}_h) \tag{3.15}$$

unde

$$\Psi_{nsk_t}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}_t} \chi^e_{nk_t}(x)(u^{(0)}_{cs}(\mathbf{r})$$
$$\Psi^h_{n'jk_t}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}_t} \sum_m \chi^h_{n'jk_t,m} u^{(0)}_{v,m}(\mathbf{r})$$

iar $u_{cs}^{(0)}(\mathbf{r})$ şi $u_{vm}^{(0)}(\mathbf{r})$ sunt funcţiile Bloch tridimensionale în punctul Γ. Sumarea după n′ în (3.15) indică posibilitatea mixării stărilor golului în diversele subbenzi de valenţă. Intr-o vale cuantică simetrică funcţiile χ^e şi χ_h au următoarele proprietăţi de simetrie

$$\begin{aligned}
&\chi^e_{n,k_t}(-x) = (-1)^{n+1} \chi^e_{n,k_t}(x) \\
&\chi^e_{n,-k_t}(x) = \chi^e_{n,k_t}(x) \\
&\chi^h_{njk_t,m}(-x) = (-1)^{n+j-m+1} \chi^h_{njk_t,m}(x) \\
&\chi^h_{nj,-k_t,m}(x) = (-1)^{j-m} \chi^h_{njk_t,m}(x)
\end{aligned} \tag{3.16}$$

und m este numărul cuantic magnetic și are valorile m=±3/2 pentru golurile grele și m=±1/2 pentru golurile ușoare. Elementul de matrice al operatorului curent (3.4) devine în acest caz

$$j^\alpha_{f,o}(\mathbf{k}=0) = \sqrt{S} \frac{-q}{m} \sum_{m'} p^\alpha_{cs,vm'} [\sum_{n'jk_t} G_{nn'j}(\mathbf{k}_t) \int \chi^*_{nk_t}(x) \chi^h_{n'j,-k_t,m}(x) dx]^* \tag{3.17}$$

In cazul mixării arbitrare a stărilor golurilor grele și ușoare, ale funcţiilor $\chi^h_{nj,-k_t}(\mathbf{r})$ se pot presupune următoarele reguli de selecţie: (1) atunci când n și n′ au paritate opusă, tranziţiile care implică excitarea excitonilor s, en-hhn′ și en-lhn′ sunt interzise în aproximaţia dipolară în timp ce tranzţiile ce implică excitarea excitonului p sunt permise; (2) atunci când polarizarea luminii $\mathbf{e} \| x$ pentru orice valoare a lui n și n′ nu se excită excitonii de tip s, en-hhn′. Aceste observaţii sunt valabile într-o structură izotropă. Într-o structură asimetrică sau în cazul când structura se află într-un câmp electric $\mathbf{F} \| x$ nu mai sunt valabile relaţiile (3.16) și deci nici regulile de selecţie propuse. Pentru un semiconductor cu benzi nedegenerate

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

expresia (3.17) se simplifică. In acest caz $\chi_{njk_t,m} \sim \delta_{jm}$ și se poate să nu se ia în considerare dependența de k_t a funcțiilor $\chi^{e,h}_{nk_t}(x)$ și mixarea stărilor golurilor din diverse subbenzi. Astfel, ec. (3.17) devine

$$j^{\alpha}_{f,0}(\mathbf{k}=0) = \sqrt{S}\frac{-q}{m}p^{\alpha}_{cs,vj}[G_{nn'}(\rho=0)\int \chi_{en}(x)\chi_{hn}(x)dx]$$

unde

$$G_{nn'}(\rho) = \sum_{\mathbf{k}_t} e^{i\mathbf{k}\cdot\rho}G_{nn'}(\mathbf{k}_t)$$

O expresie similară a fost utilizată pentru calculul relației (3.12). In Fig. A 1 se prezintă spectrul de absorbție, tranziția interbenzi, într-o structură $GaAs/Al_{0,27}Ga_{0.73}As$ cu valea cuantică cu lățimea de 10,2 nm. Se observă maxime pronunțate asociate cu excitonii 1s: e1-hh1 și e1-lh1. Tranziția e2-hh2 corespunzătoare unui exciton 1s și tranziția e1-lh1 corespunzătoare unui exciton 2p sunt foarte apropiate între ele și apare în spectru un dublet. Starea excitonului e1-lh1 este discretă iar cea a excitonului e2-hh2 este în continuu. Pe figură, cu linie continuă sunt prezentate rezultatele teoretice în acord cu relația (2.7). Se observă o bună concordanță între teorie si rezultatele experimentale [1]. Intre maximul e1-lh1 și maximul e2-hh2 există un platou așa cum rezultă și din ecuația (2.8).

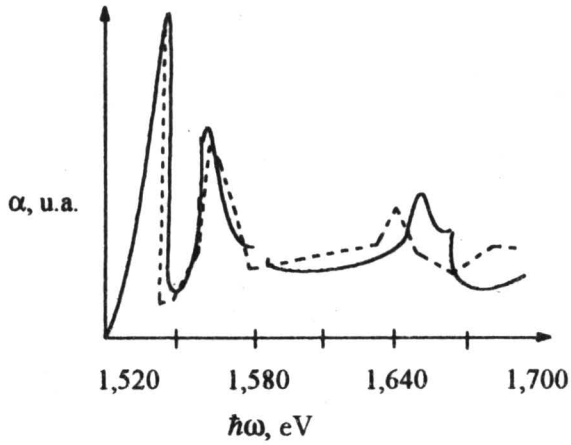


Fig. A1

Bibliografie

1. H. Chu, Y. C. Chang, Phys. Rev. B 39, 1086 (1989).

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Cuprins

Cuvânt înainte 3

Capitolul I. ***Heterojoncţiuni***

1.1. Consideraţii generale 5
1.2. Alinierea benzilor. Discontinuităţile dintre benzi 7
1.3. Regiunea de sarcină spaţială 11
1.4. Curentul electric 13
1.5. Heterojoncţiuni tensionate mecanic 16
1.6. Determinarea experimentala a discontinuităţii benzilor la interfaţă 20
Bibliografie 22

Capitolul II. ***Văi cuantice şi superreţele***

2.1. Nivelurile de energie ale electronilor 23
2.2. Densitatea de stări de energie 27
2.3. Valea cuantică de potenţial cu pereţi finiţi 30
2.4. Nivelurile de energie ale golurilor în valea cuantică de potenţial 33
2.5. Valea cuantică de potenţial de formă triunghiulară 38
2.6. Structura cu două văi cuantice de potenţial 40
2.7. Superreţele 44
2.8. Fenomene de tunelare 48
2.9. Excitonii 54
2.10. Niveluri de impurităţi în valea cuantica de potenţial 63
2.11. Impurităţi în superreţele 66
2.12. Niveluri de energie localizate pe defecte ale superreţelei 70
2.13. Spectrul de energie a electronilor în valea cuantica şi în superreţea în prezenţa unui câmp electric 73
2.14. Superreţele optice 76
2.15. Văi cuantice şi superreţele supuse la tensiuni mecanice 78
2.16. Superreţele cu concentraţia impurităţilor de dopare modulată spaţial 83
2.17. Superreţele cu structura multipla p-i-n-i 87
Bibliografie 91

Capitolul III. ***Proprietăţile optice***

3.1. Tranziţii bandă-bandă 92
3.2. Coeficientul de absorbţie 96
3.3. Elementul de matrice al tranziţiei de dipol 97
3.4. Tranziţii intersubbenzi din aceeaşi bandă de energie 100
3.5. Efectele excitonice 102

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

3.6. Emisia radiaţiei.Rata de emisie spontană 105
3.7. Amplificarea radiaţiei 107
3.8. Elementul de matrice al tranziţiei optice.Reguli de selecţie 110
3.9. Efecte dependente de polarizarea luminii 113
3.10. Efecte neliniare şi electrooptice 116
3.11. Fotoreflectanţa 125
3.12. Rolul neregularităţilor de interfaţă asupra spectrului excitonic din valea cuantică de potenţial 127
3.13. Rezonanţa ciclotronică 129
3.14. Masa efectiva a electronilor în superreţele 133
Bibliografie 140

Capitolul IV. *Laseri şi diode luminescente*

4.1. Efectul laser 141
4.2. Curentul de prag în laserul cu heterojoncţiune dublă 144
4.3. Laserul cu vale cuantică de potenţial 148
4.4. Lărgirea liniei spectrale de emisie datorită relaxării intrabandă a purtătorilor de sarcină 151
4.5. Creşterea valorii elementului de matrice al tranziţiei optice în valea cuantică de potenţial în cazul polarizării TE a radiaţiei 155
4.6. Curentul de prag în laserul cu vale cuantica de potenţial 157
4.7. Laseri cu stratul văii cuantice tensionat mecanic 164
4.8. Laseri cu văi cuantice multiple 166
4.9. Laseri cu fire cuantice 167
4.10. Tehnologiile de fabricare a laserilor cu fire cuantice 171
4.11. Laserul unipolar în cascadă 173
4.12. Diode luminescente 175
Bibliografie 177

Capitolul V. *Detectori de radiaţie în infraroşu*

5.1. Consideraţii generale 178
5.2. Detectori cu o singură vale cuantică de potenţial 181
5.3. Detectori cu văi cuantice multiple 185
5.4. Detectori cu văi cuantice multiple cu excitare de pe stări legate pe stări din spectrul continuu 192
5.5. Detectori cu văi cuantice şi bariere asimetrice 198
5.6. Detectori cu superreţele cu structură de minibenzi de energie 201
5.7. Detectori de radiaţie cu superreţele de tip p 203
5.8. Detectori de radiaţie cu benzi de energie indirecte 204
5.9. Detectori care funcţionează pe baza efectului fotovoltaic 205
5.10. Detectori pentru radiaţii de mai multe lungimi de undă 205
5.11. Cuplajul optic 206
5.12. Sensori de imagine 211
Bibliografie 213

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Capitolul VI. ***Fenomene de transport al curentului electric în structuri cuantice***

6.1. Moblitatea purtătorilor de sarcina în cazul transportului paralel cu suprafaţa stratului subţire 214
6.2. Transportul purtătorilor de sarcină perpendicular pe interfeţe 215
6.3. Curentul electric într-un fir cuantic 221
6.4. Formula lui Landauer 223
6.5. Focalizarea fascicolului de electroni balistici 225
6.6. Efectul Hall în câmp magnetic slab.Interferometrul Fabry-Perot 227
6.7. Efectul unui singur electron.Blocarea Coulomb 230
6.8. Cuantificarea energiei electronilor în câmp magnetic intens 231
6.9. Efectul Hall cuantic 236
6.10. Magnetorezistenţa 237
6.11. Cuantificarea în câmp magnetic în cazul văii de formă parabolică 239
6.12. Tranzistorul cu efect de câmp cu dopare modulată 241
6.13. Alte tipuri de tranzistoare cu efect de câmp 248
6.14. Tranzistoare bazate pe transportul electronilor perpendicular pe interfeţe 250
6.15. Tranzistorul bipolar cu heterojoncţiuni 251
Bibliografie 256

Capitolul VII. ***Epitaxia cu fascicule moleculare***

7.1. Consideraţii generale 257
7.2. Fascicule moleculare 258
7.3. Celule de efuzie 262
7.4. Componentele instalaţiei de epitaxie cu fasccicule moleculare 264
7.5. Pregătirea substratului 265
7.6. Controlul şi calibrarea fascicoilului molecular 266
7.7. Cinetica procesului de creştere epitaxială 268
7.8. Difracţia de electroni rapizi prin reflexie 270
Bibliografie 274

Capitolul VIII. ***Epitaxia din fază de vapori organo-metalică***

8.1. Procesele fundamentale 275
8.2. Instalaţia de crestere 279
8.3. Mecanismele de reacţie şi cinetica de creştere 280
Bibliografie 283

Anexa. Constanta dielectrică 285
1. Teoria elementară a constantei dielectrice 285
2. Constanta dielectrică într-o structură periodică 289
3. Constanta dielectrică în cazul tranziţiilor excitonice 292
Bibliografie 296
Cuprins 297

VERIFICAT 2007
BIBLIOTECA CENTRALĂ UNIVERSITARĂ
VERIFICAT 2017

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

Tiparul s-a executat sub c-da 333/1997
la Tipografia Editurii Universităţii din Bucureşti

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro

ISBN - 973 - 575 - 209 - 3

Lei 15500

https://biblioteca-digitala.ro / https://unibuc.ro